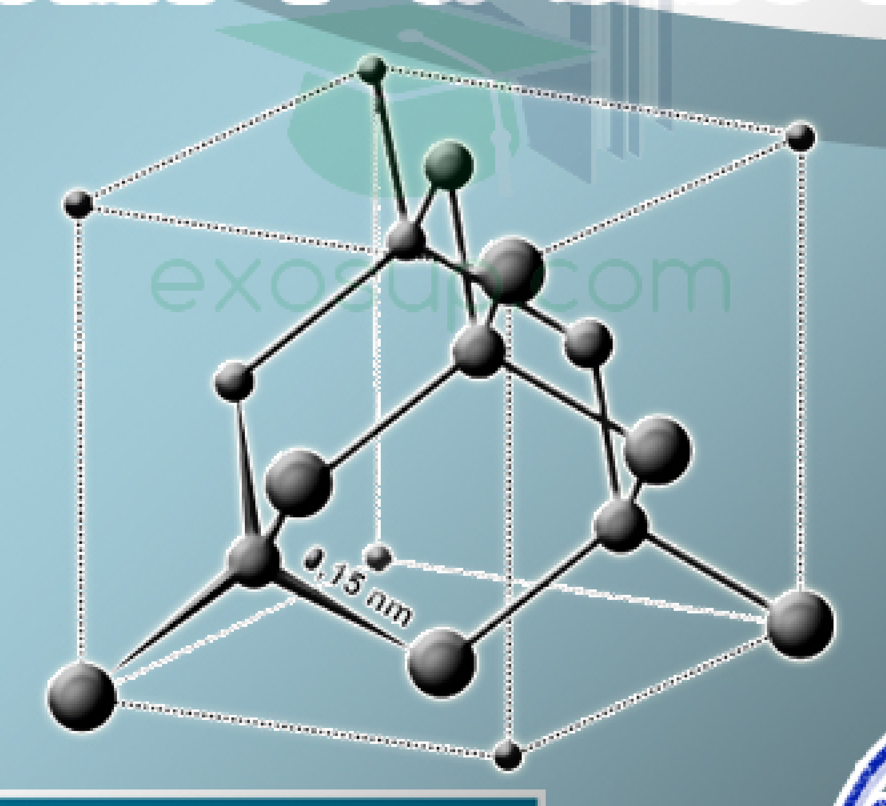
جامعة شعيب الدكالي
كلية العلوم
الجديدة



CORRECTION DES TD

CRISTALLOGRAPHIE _GÉOMÉTRIQUE

SMP4 & SMC4





إعداد نادي النجاح

2015 - 2016

clubnajah.blogspot.com

/ succes.club



تمارين الأعمال التوجيهية رفقة التصحيح

من جمع وترتيب نادي النجاح

تشكراتنا لكل من ساهم من قريب أو بعيد في إنجاز هذا العمل ونخص بالذكر الطالبة آسية عاطف والطالب سعيد بوزكري لمساهمتهم في إعداد وإنجاح هذا العمل

عن المكتب المسير للنادي



Email: Clubnajah2013@gmail.com

www.clubnajah.blogspot.com

www.facebook.com/succes.club

UNIVERSITE CHOUAIB DOUKKALI
FAUCLTE DES SCIENCES
EL JADIDA
Département de Chimie
****

Année Universitaire 2014/2015
Filières SMC_4 , SMP_4

T.D. Cristallographie géométrique

Exercice 1:

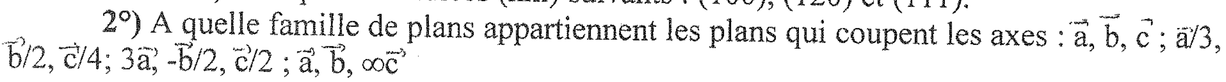
Soit le repère cristallographique orthogonal $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$.

1°) Représenter :

a) Les directions des rangées : [100], [120] et [123].

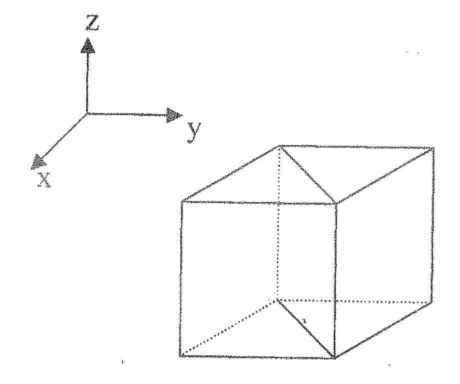
b) Les plans d'indices (hkl) suivants : (100), (120) et (111).

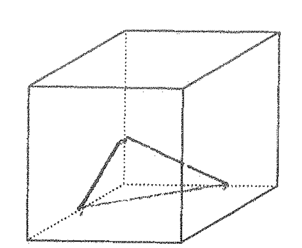
2°) A quelle famille de plans appartiennent les plans qui coupent les axes : $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$; $\vec{a}/3$,

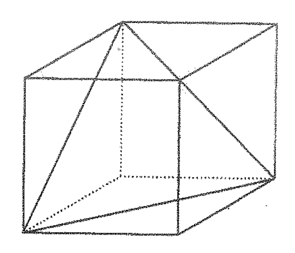


$\vec{b}/2$, $\vec{c}/4$; $3\vec{a}$, $-\vec{b}/2$, $\vec{c}/2$; $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\infty\vec{c}$

3°) Quels sont les indices de Miller (hkl) des trois familles de plans réticulaires représentées sur le schéma suivant :







4°) Calculer l'angle des rangées [111] et [100] d'un réseau cubique de paramètre a.

Exercice 2 :

Expliquer pourquoi le mode de réseau de Bravais C n'existe pas dans un système cristallin quadratique.

Exercice 3 :

1- Montrer qu'un axe $\bar{2}$ est équivalent à un plan miroir.
2- Montrer qu'un axe $\bar{6}$ est équivalent à un axe 3 perpendiculaire à un miroir.

Exercice 4 :

Donner la projection stéréographique des groupes ponctuels de symétrie suivants :

- 3m, 4mm, 2/m,
- 32, 422, 222.
- Que peut-on conclure ?

Exercice 5 :

1- Donner en schématisant les positions équivalentes à (x, y, z) dans les cas suivants :
   - a- Un axe 2 situé sur ¼ 0 z,
   - b- Un axe 2_1 situé sur ¼ 0 z,
   - c- Un axe 2_1 situé sur ¼ y 0,
   - d- Un centre d'inversion situé en ¼ ¼ ¼,
   - e- Un axe 4_1 situé sur 0 0 z,
   - f- Un axe 4_2 situé sur 0 0 z.



2- Même question dans les cas suivants :
   - a- Un plan miroir m situé en x y 0,
   - b- Un plan miroir m situé en x ¼ z,
   - c- Un plan de glissement a situé en x y ¼,
   - d- Un plan de glissement oblique n situé en ¼ y.z.



Exercice 6 :

Etablir dans chacun des cas suivants, le mode du réseau et le groupe spatial engendrés par les positions générales suivantes :

- a- (x, y, z) ; $(x, \bar{y}, z)$,
- b- (x, y, z) ; $(\bar{x}, y, \bar{z})$; $(\bar{x}, \bar{y}, z)$; $(x, \bar{y}, \bar{z})$,
- c- (x, y, z) ; $(½ + x, ½ - y, ½ - z)$,
- d- (x, y, z) ; $(x, y, \bar{z})$; $(\bar{x}, \bar{y}, z)$; $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$,
- e- (x, y, z) ; $(x, \bar{y}, z)$; $(½ + x, y, ½ + z)$; $(½ + x, \bar{y}, ½ + z)$,
- f- (x, y, z) ; $(\bar{x}, y, \bar{z})$; $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$; $(x, \bar{y}, z)$; $(½ + x, y, ½ + z)$; $(½ - x, y, ½ - z)$; $(½ - x, \bar{y}, ½ - z)$; $(½ + x, \bar{y}, ½ + z)$,
- g- (x, y, z) ; $(\bar{y}, x, \bar{z})$; $(\bar{x}, \bar{y}, z)$; $(y, \bar{x}, \bar{z})$; $(½ + x, ½ + y, ½ + z)$; $(½ - y, ½ + x, ½ - z)$; $(½ - x, ½ - y, ½ + z)$; $(½ + y, ½ - x, ½ - z)$.

Exercice 7 :

Soit le groupe d'espace Pnma.

1- Donner la signification de ce symbole.
2- Donner son groupe ponctuel de symétrie et sa projection stéréographique.
3- Schématiser ce groupe d'espace dans le plan xOy en prenant l'origine au point d'intersection des trois plans de symétrie. En déduire les coordonnées des positions générales, conclure.
4- Déterminer les coordonnées des positions générales en positionnant l'origine sur un centre de symétrie.
5- Quelles sont les positions particulières ?
6- Est-ce que la classe cristalline relative au groupe d'espace Pnma est holoèdre ?



UNIVERSITE CHOUAIB DOUKKALI
FACULTE DES SCIENCES
EL JADIDA
Département de Chimie

Année Universitaire 2014/2015



TD . CRISTALLOCHIMIE
SMC_4 SMP_4

A - STRUCTURES CUBIQUES :

1- On donne les paramètres cristallins des mailles cubiques des deux variétés allotropiques du fer.

a_α = 2.86 Å pour le fer α (système C.C)

a_γ = 3.56 Å pour le fer γ (système C.F.C)

a. Calculer le rayon atomique du fer pour chacune des deux variétés.
b. Calculer la densité du fer pour chacune des deux structures. (M_{fe} = 55.8g/mol).
c. Calculer la compacité et la coordinence de chaque structure.
d. Préciser la forme et le nombre de sites interstitiels pour les deux structures cubiques

B- TRUCTURES HEXAGONALES :

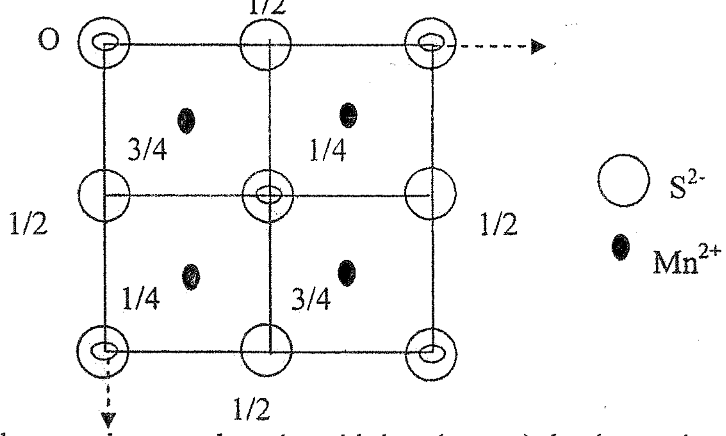
Le magnésium cristallise dans une structure hexagonale compacte qu'on admettra idéale.

1°) Dessiner la maille en perspective et sur le plan (xoy) (on se limitera au 1/3 de la maille).
2°) Montrer que le paramètre c de la maille est lié au paramètre a par la relation $c = \sqrt{8/3}a$.
3°) Déterminer la compacité et la coordinence du magnésium dans cette structure.
4°) La densité du magnésium par rapport à l'eau est d = 1,74. Calculer le rayon métallique du magnésium (M_{Mg} = 24,3 g/mol).

C - STRUCTURES IONIQUES :

EXERCICE1 *(Structure type ZnS Blende)*

L'analyse chimique de la roche « Albandite » montre qu'elle est constituée des ions Mn^{2+} et S^{2-}. La diffraction des rayons X montre que l'Albandite cristallise dans un système cubique de paramètre a = 5.60 Å et de masse volumique ρ = 3.29 (g/cm³). La projection de la maille élémentaire de sa structure sur le plan réticulaire (010) est la suivante :



1) a) Quelles sont les coordonnées réduites (x, y, z) de chaque ion ?

b) Effectuer la translation appropriée pour passer de la projection ci-dessus à la projection (xoz) d'origine Mn^{2+} ; donner alors la coordinence de S^{2-}.
c) Quel est le nombre de motifs par maille ? Déduire la formule brute de l'Albandite (Justifier).
d) Calculer la distance Mn – S.

2) a) Quel est l'empilement formé par Mn^{2+} et par S^{2-} en donnant le mode du système cristallin (Expliquer).

b) Donner la compacité de cette structure en fonction du $R = \frac{r_{Mn^{2+}}}{r_{S^{2-}}}$ et le domaine de variation de R

M (Mn) = 54.94 (g/mol)   et   M (S) = 32.06 (g/mol).

EXERCICE 2 ***(Structure type Antifluorine)***

Le tellure de potassium K_2Te cristallise dans le type de structure antifluorine : les ions tellure occupent les nœuds d'un réseau cubique à faces centrées et les ions potassium, les sites tétraédriques. L'arête de la maille vaut 8.17 Å.

1) a. Donner la liste des positions atomiques.
   b. Indiquer le nombre de motifs.
   c. Quelle est la coordinance ?

2) a. Calculer la densité de ce cristal.
   b. Retrouver la relation entre le paramètre de maille et les rayons ioniques de K^+ et Te^{2-} et comparer la valeur numérique à celle donnée.

Données : M_K = 39.1 g ; M_{Te} = 127.6 g ; N = 6.022.10^{23} ; r_{K^+} = 1.33 Å, $r_{Te^{2-}}$ = 2.21 Å


EXERCICE 3 ***(Structure type NiAs)***

Le séléniure de fer cristallise dans le même type de structure que NiAs. La maille élémentaire est hexagonale de paramètres : a = 3.64 Å et c = 5.96 Å.

1) a. Donner les coordonnées réduites de chaque ion
   b. Etablir la projection de la pseudo-maille dans le plan (001).

2) Indiquer le motif et la coordinance de chaque type d'ion.

3) Vérifier que le séléniure de fer cristallise dans une structure hexagonale compacte idéale

EXERCICE4 ***(Structure type ZnS wurtzite)***

Dans l'oxyde de béryllium BeO, les ions O^{2-} forment un empilement hexagonal compact. Les cations Be^{2+} occupent la moitié des sites tétraédriques du réseau anionique.

1) Représenter la maille élémentaire (on se limitera au 1/3 de la maille hexagonale).
2) Calculer les paramètres de la maille sachant que les rayons des ions O^{2-} et Be^{2+} sont respectivement 1,40 Å et 0,27 Å.
3) Donner la projection de la maille perpendiculairement à la direction [0 0 1]



Exercice 1

Rappel :

Si on compare l'ordre des atomes dans 3 états de la matière.

- T ↗ , P = Cte
  les atomes agités
  gaz réels

↓

- T ↘ , P = Cte
  les atomes sont (-) agités et on peut avoir des liaisons entre les atomes.

↓

- P ↘ , P = Cte
  les atomes s'ordonnent et forment plus de liaisons

↓

le vide

- Formation d'un empilement compact
  empilement compact chaque atome entoure de 6 atomes
- Un empilement semi compact

plan

- Un empilement non compact

Aucun Tangence entre les atomes.

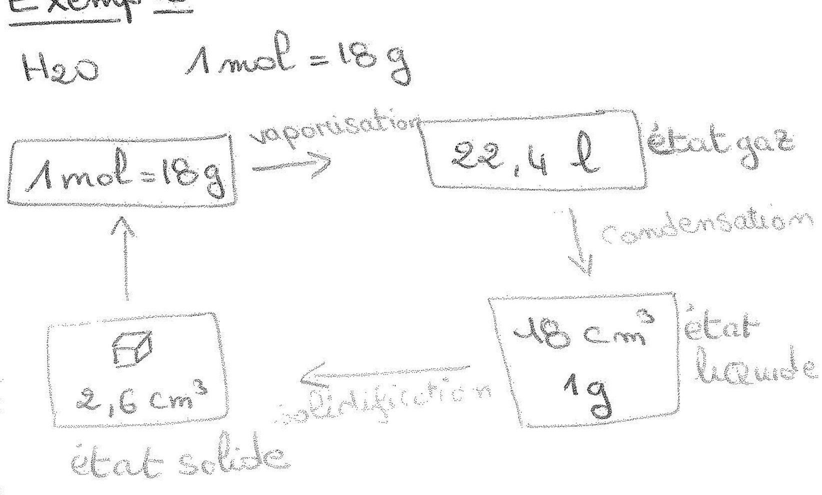
RQ : les atomes cessent de vibrations ou bien de s'agiter à 0°K (-273°C)

Cristallographie géométrique

- L'état gazeux est le moins ordonné, l'état liquide peut ordonné, L'état solide est le plus ordonnée.
- s'il y'a un ordre étendu sur tout le solide → Solide cristallisé.

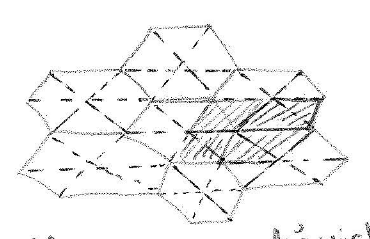
Exemple

H_2O 1 mol = 18 g



Maille élémentaire

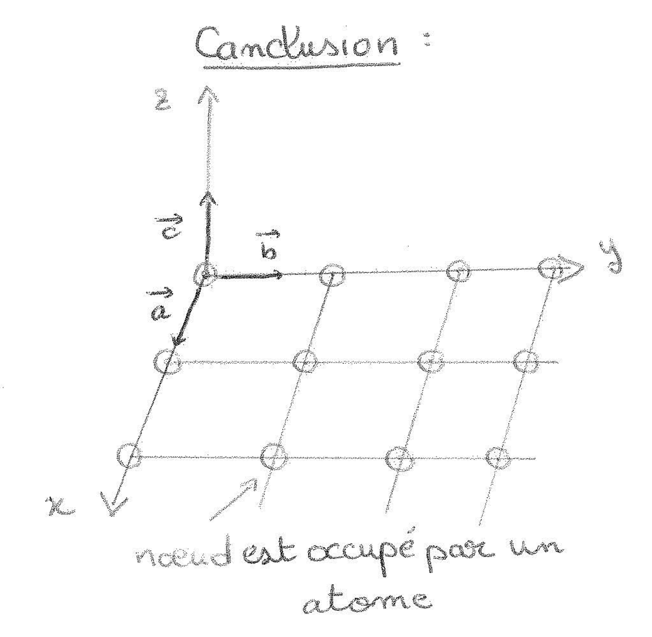
⊛ L'unité la plus élémentaire qui se répètent dans les 3 dimensions de l'espace



La maille est caractéristique par 6 paramètres $\begin{cases} a, b, c \\ \alpha, \beta, \gamma \end{cases}$

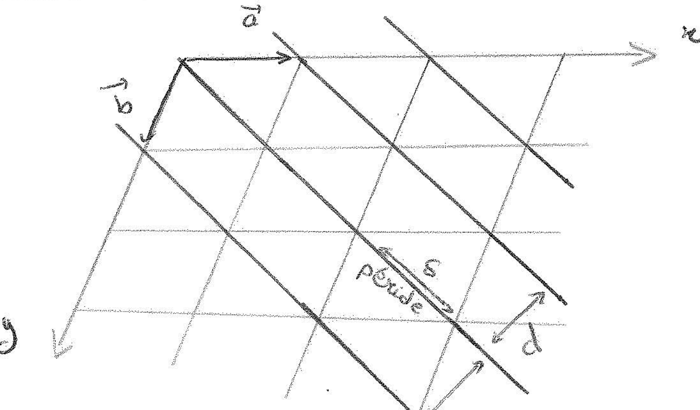
les formes que peut prendre une maille sont du nombre de 7 système cristallin

Conclusion :



- Un noeud est point géométrique qui peut être occupé par un atome ou non.
- Une rangée réticulaire : direction Cristallographie - droite cristallographie - Succession de noeuds allignés et équidistifs

la distance entre deux noeuds est la période δ.



Une famille de rangées est une ensemble de rangées // et équidisfiant, chaque famille de rangées est designée par les indices u, v, w

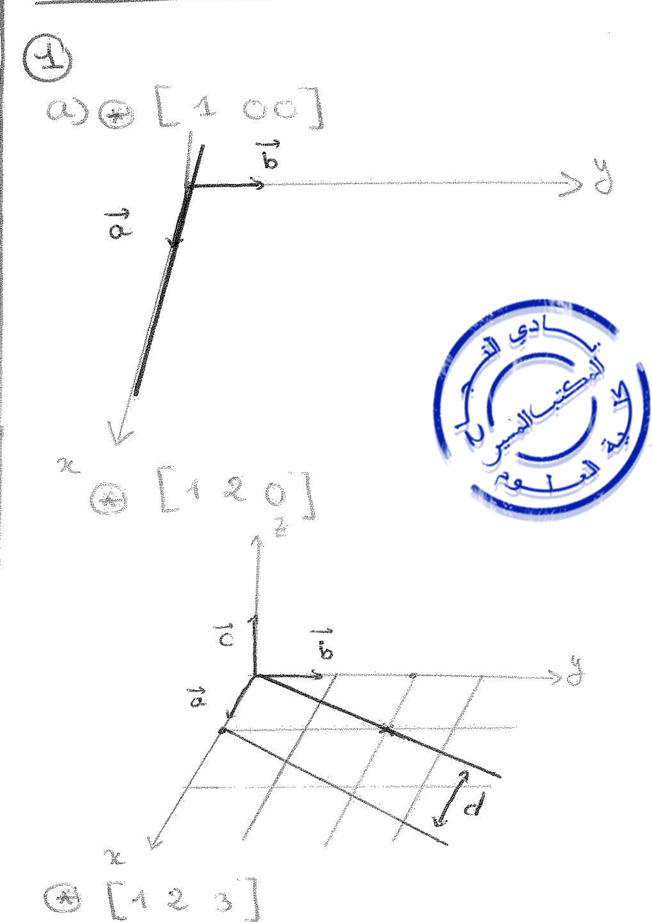
(Notés entre crochet et sans ,) [u,v,w]

* u, v, w sont les coordonnées du 1er noeud aprés l'origine donc on doit chercher les indices sur la rangée par l'origine.

* ∀ la famille de rangées, il ya nécessairement une rangée qui passe par l'origine.

Exercice 1

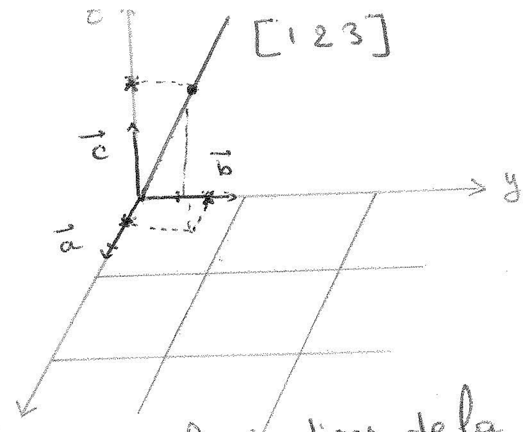
① a) * [1 0 0]



* [1 2 3]

Si un rangé passe par un noeud de Cordonnés (u, v, w) il passe nécessairement par le noeud du Cordonnées (nu, nv, nw)

- [1 2 3] passe par le noeud (1, 2, 3), passe par le noed $\frac{1}{3}(1,2,3) = (\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 1)$



- Trouver les indices de la rangées qui passe par les noeuds $(1,2,0)$ et $(1,3,1)$ → adjacent

→ On fait la translation à l'origine

$(1,2,0) \xrightarrow{T(-1,-2,0)} (0,0,0)$

$(1,3,1) \xrightarrow{T(-1,-2,0)} (0,1,1)$

c'est la famille $[0\ 1\ 1]$

autrement :

$(1,3,1) \xrightarrow{T(-1,3,-1)} (0,0,0)$

$(1,2,0) \xrightarrow{T(-1,-3,-1)} (0,-1,-1)$

C'est la famille $[0\ \bar{1}\ \bar{1}]$

- $[0\ 1\ 1]$ et $[0\ \bar{1}\ \bar{1}]$ désignent la même famille
- $[u\ v\ w]$ $[\bar{u}\ \bar{v}\ \bar{w}]$ désignent la même famille

⇒ Un plan réticulaire est définie par 3 noeuds non allignés.

⇒ dans un réseau on a une infenité de possibilité de ranger des plans dans des familles.

y
x

= Une famille de plans $(h\ k\ l)$
= Une famille $(h'\ k'\ l')$

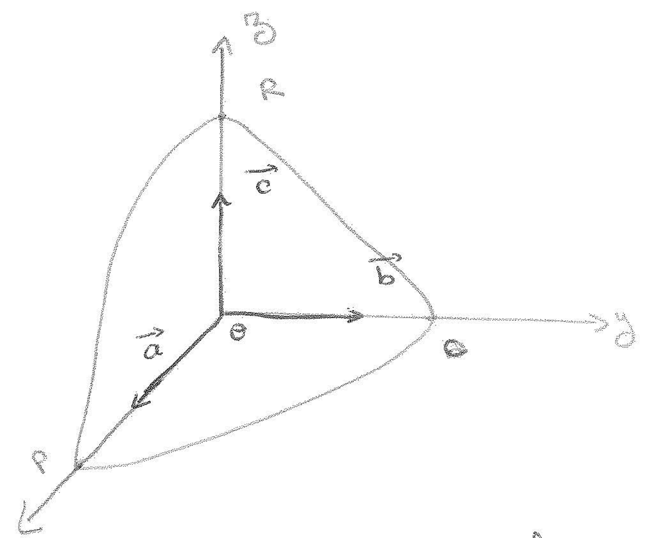
- distance entre les plans : d_{hkl}

$$h = \frac{1}{|\overrightarrow{OP}|} |\vec{a}|$$

$$k = \frac{1}{|\overrightarrow{OR}|} |\vec{b}|$$

$$l = \frac{1}{|\overrightarrow{OQ}|} |\vec{c}|$$





⇒ L'indice de miller sont les inverses des longueurs découpés (intersections) sur les axes ox, oy, oz par le premier plan qui ne contient pas l'origine

N.B : - pour indexer une famille de rangées on prend la rangée qui passe par l'origine

- pour indexer une famille de plans on prend 1er plan qui ne contient pas l'origine.

b) ⊛ (100)

⊛ le plan (1,0,0) coupe l'axe :

- ox en $\frac{\vec{a}}{h} = \frac{\vec{a}}{1} = \vec{a}$
- oy en $\frac{\vec{b}}{k} = \frac{\vec{b}}{0} = \infty$ le plan // à oy
- oz en $\frac{\vec{c}}{l} = \frac{\vec{c}}{0} = \infty$ le plan // à oz

z

y

x

⊛ (120)

⊛ (120) coupe l'axe

- ox en $\frac{\vec{a}}{1} = \vec{a}$
- oy en $\frac{\vec{b}}{2}$
- oz en $\frac{\vec{c}}{0} = \infty$

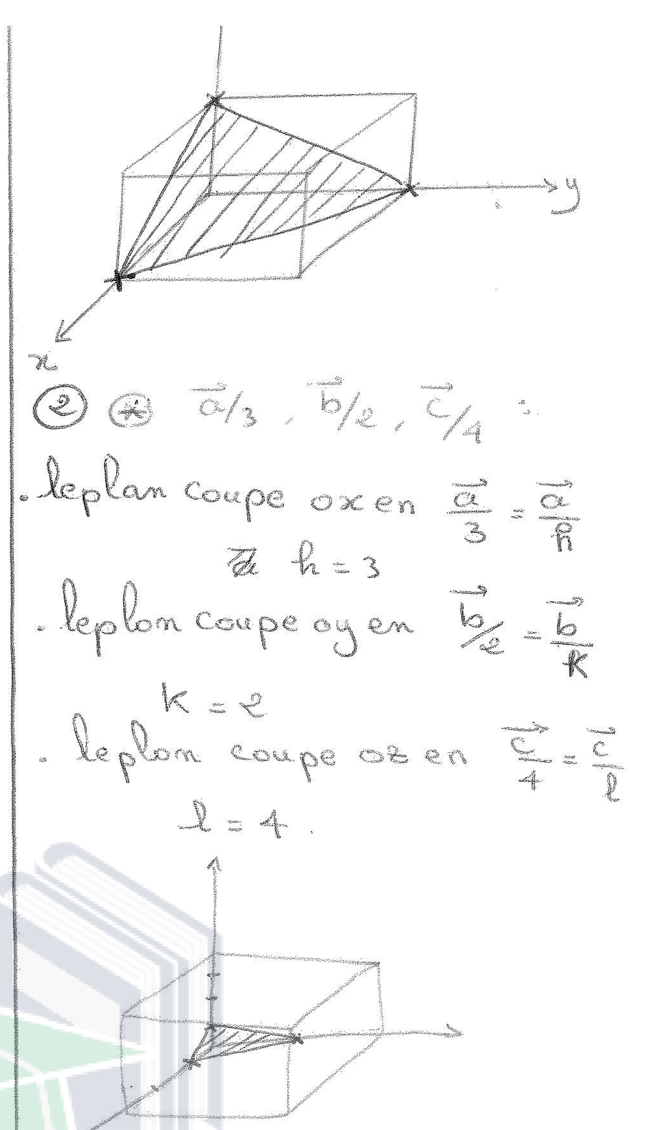
⊛ (111)

le plan coupe l'axe :

ox en $\frac{\vec{a}}{1} = \vec{a}$

oy en $\frac{\vec{b}}{1} = \vec{b}$

oz en $\frac{\vec{c}}{1} = \vec{c}$



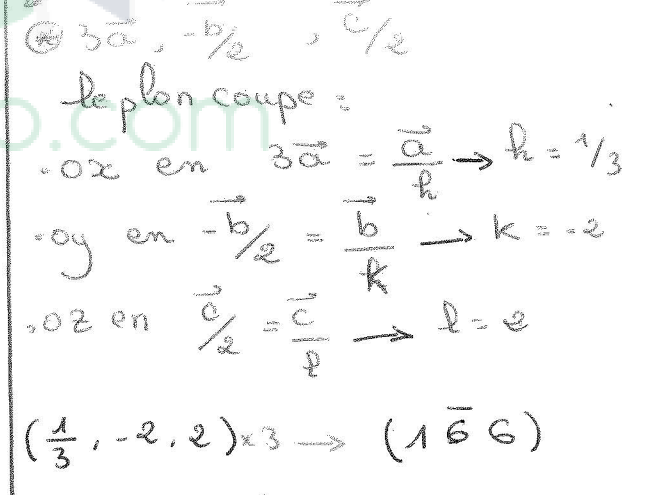
② ⊛ $\vec{a}/3$, $\vec{b}/2$, $\vec{c}/4$:

- le plan coupe ox en $\frac{\vec{a}}{3} = \frac{\vec{a}}{h}$

  $h = 3$
- le plan coupe oy en $\vec{b}/2 = \frac{\vec{b}}{k}$

  $k = 2$
- le plan coupe oz en $\frac{\vec{c}}{4} = \frac{\vec{c}}{l}$

  $l = 4$.

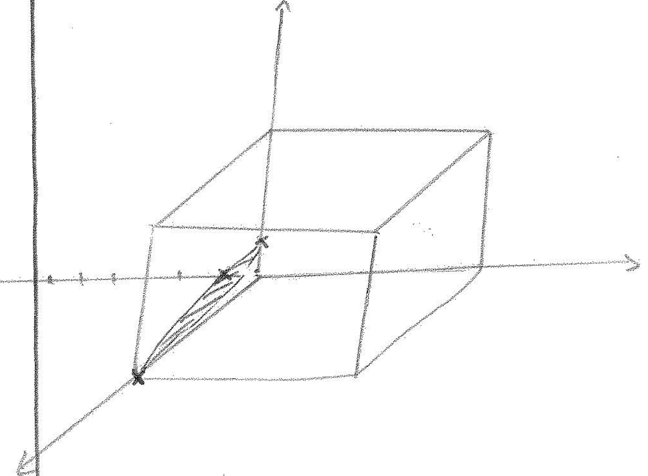


⊛ $3\vec{a}$, $-\vec{b}/2$, $\vec{c}/2$

le plan coupe :

- ox en $3\vec{a} = \frac{\vec{a}}{h} \rightarrow h = 1/3$
- oy en $-\vec{b}/2 = \frac{\vec{b}}{k} \rightarrow k = -2$
- oz en $\vec{c}/2 = \frac{\vec{c}}{l} \rightarrow l = 2$

$(\frac{1}{3}, -2, 2) \times 3 \rightarrow (1\,\bar{6}\,6)$



⊛ a , b , ∞c

· ox en $\vec{a} = \frac{\vec{a}}{h} \rightarrow h = 1$

· oy en $\vec{b} = \frac{\vec{b}}{k} \rightarrow k = 1$

· oz en $\infty\vec{c} = \frac{\vec{c}}{l} \rightarrow l = 0$

③

⊛ le plan contient l'origine, il faut faire un Translation.

le nouveau plan coupe :

· ox en $\frac{\vec{a}}{h} = \frac{\vec{a}}{1} \rightarrow h = 1$

· oy en $\frac{\vec{b}}{k} = -1\vec{b} \rightarrow k = \bar{1}$

· oz en $\frac{\vec{c}}{l} = \infty \rightarrow l = 0$

⊛ le plan coupe l'axe :

· ox en $\frac{\vec{a}}{h} = 1 \rightarrow h = 1$

· oy en $\frac{\vec{b}}{k} = 1 \rightarrow k = 1$

· oz en $\frac{\vec{c}}{l} = 1 \rightarrow l = 1$

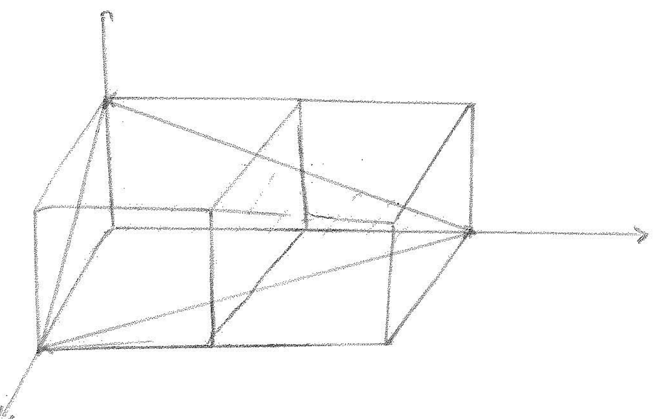
⊛ le plan coupe l'axe :

· ox en $\frac{\vec{a}}{h} = \frac{\vec{a}}{2} \rightarrow h = 2$

· oy en $\frac{2\vec{b}}{3} = \frac{\vec{b}}{k} \rightarrow k = 3/2$

· oz en $\frac{\vec{c}}{l} = \frac{\vec{c}}{4} \rightarrow l = 4$

$(2, \frac{3}{2}, 4) \times 2 \longrightarrow (4\,3\,8)$

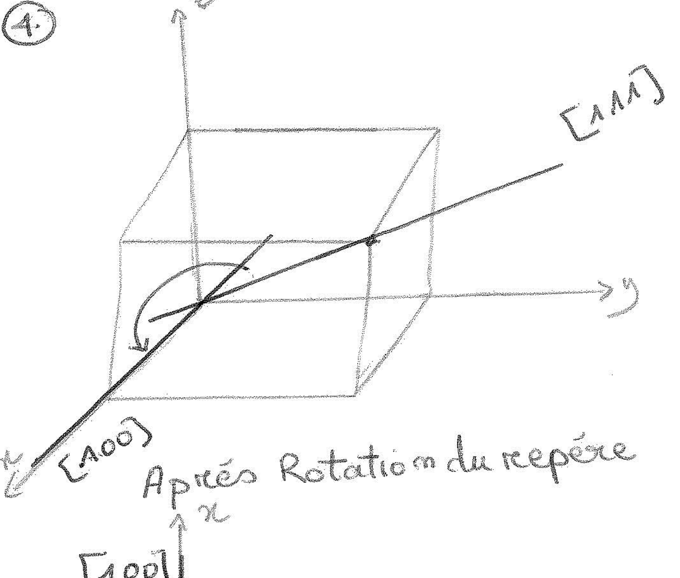


⊛ 1er repère : $(1 \; ^1/_2 \; 1)$ ⎤ ×2

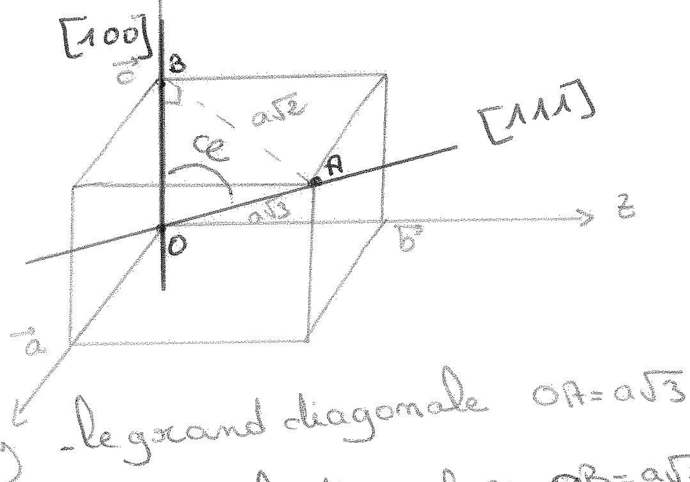
⊛ 2ème repère : $(2 \; 1 \; 2)$ ⎦

⇒ Changement de repère.

④



Aprés Rotation du repère



- le grand diagonale $OA = a\sqrt{3}$

- le diagonale d'une face $AB = a\sqrt{2}$

$\cos\varphi = \frac{OB}{OA} = \frac{a}{a\sqrt{3}} = \frac{\sqrt{3}}{3}$

$\sin\varphi = \frac{AB}{OA} = \frac{a\sqrt{2}}{a\sqrt{3}} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$

$\varphi = 54,7362°$



Autrement

le produit scalaire $\vec{V}_{[111]}\ \vec{V}_{[100]}$

$\varphi = (\widehat{\vec{V}_{[111]}, \vec{V}_{[100]}})$

$\vec{V}_{[111]} = \vec{a} + \vec{b} + \vec{c}$

$\vec{V}_{[100]} = \vec{a}$

$\vec{V}_{[111]} \cdot \vec{V}_{[100]} = |\vec{V}_{(111)}| \cdot |\vec{V}_{(100)}| \cos\varphi$

$\vec{a} \cdot |\vec{a}| = \sqrt{a^2+b^2+c^2}\sqrt{a^2}\cos\varphi$

$= \sqrt{3a^2}\sqrt{a^2}\cos\varphi$.

$\cos\varphi \times \sqrt{3}\,a^2 = a^2$

$\Rightarrow \cos\varphi = \frac{1}{\sqrt{3}} = \frac{\sqrt{3}}{3}$.

---

③

② $\Rightarrow$ $ox = \frac{1}{h} = 1 \Rightarrow h = 1$

$oy = \frac{1}{k} = 1 \Rightarrow k = 1$

$oz = \frac{1}{\ell} = 1 \Rightarrow \ell = 1$

plan $(1, 1, 1)$

③ $\Rightarrow$ $ox = \frac{1}{h} = \frac{1}{2} \Rightarrow h = 2$

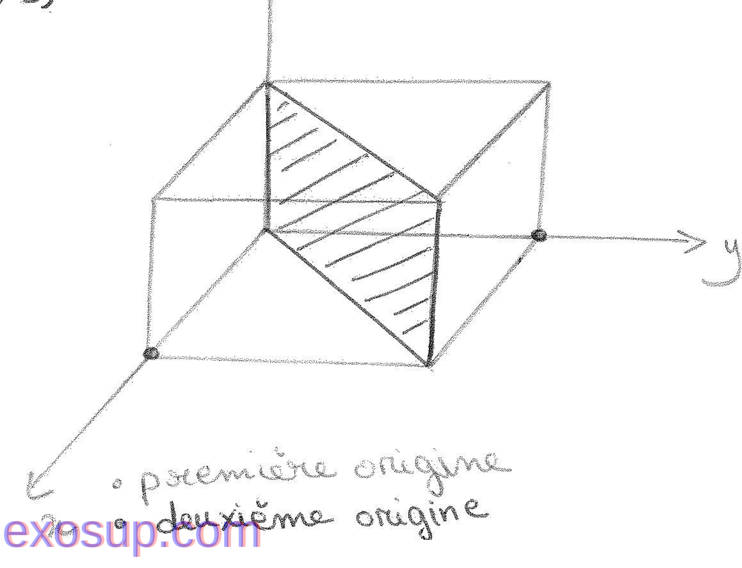
$oy = \frac{1}{k} = \frac{2}{3} \Rightarrow k = 3/2$

$oz = \frac{1}{\ell} = \frac{1}{3} \Rightarrow \ell = 3$.

plan $(2, 3/2, 3) \times 2 \Rightarrow (4, 3, 6)$



① $\Rightarrow$



• coupe oz en $\infty \Rightarrow \ell = \frac{1}{\infty} = 0$

• coupe $\vec{oz}$ en -1

• coupe $\vec{oy}$ en 1 $\Rightarrow$ plan $(\bar{1}10)$

Changement d'origine

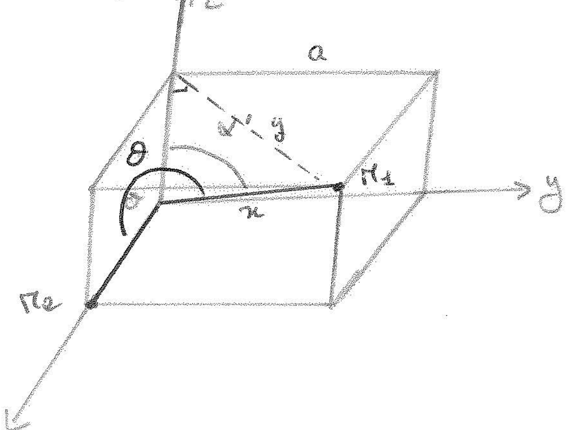
• coupe ox en 1

• coupe oy en -1

• coupe oz en 0

$\Rightarrow$ plan $(1\,\bar{1}\,0)$

④ - Angle entre $[111]$ et $[100]$



$[111] \Rightarrow \vec{OM_1}$ tq $M_1 \begin{vmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{vmatrix}$

$[100] \Rightarrow \vec{OM_2}$ tq $M_2 \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix}$

$x^2 = y^2 + a^2$

$x^2 = 2a^2 + a^2 = 3a^2$

$x = a\sqrt{3}$

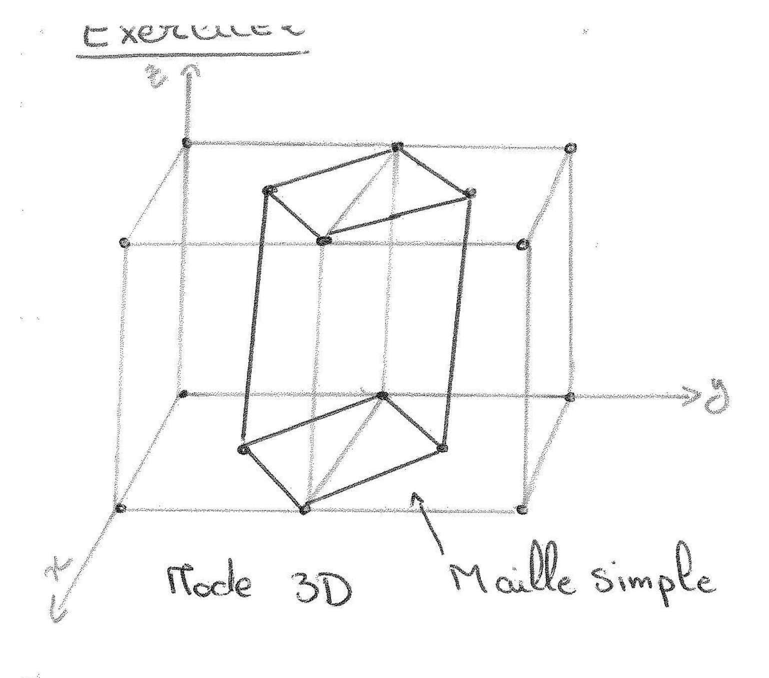
$\cos\alpha' = \frac{a}{a\sqrt{3}} = \frac{\sqrt{3}}{3}$

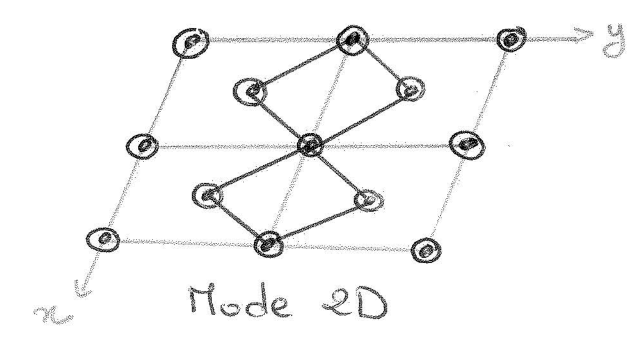
$\alpha' =$

$\theta = \alpha' + \frac{\pi}{2}$



Exercice 2



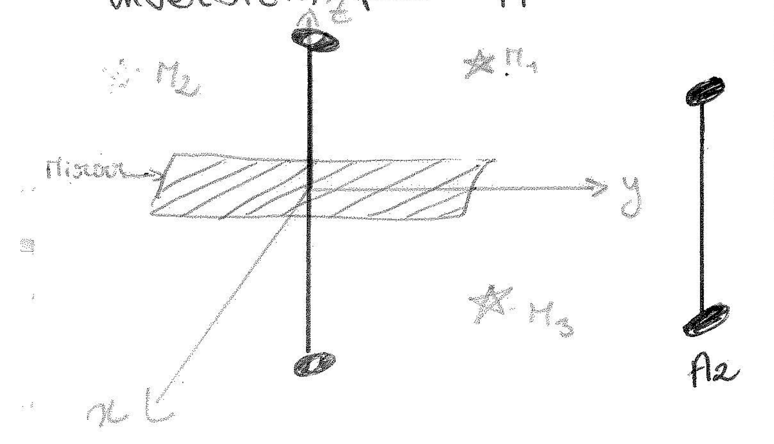


Mode C n'existe pas dans système Quadratique : Car il y a une maille plus petit celle existe le ~~te~~ système correspondance.

Exercice 3

(1) Mq : $\bar{2} \equiv m$

$\bar{2}$: Rotation de π $\left(\frac{2\pi}{2}\right)$ suivante d'une inversion par rapport à O.



$M_1 \xrightarrow{2} M_2$ $\qquad$ $M_1 \xrightarrow{...} M_3$

$M_1 \xrightarrow{\bar{2}} M_3$ $\qquad$ $m \perp 3$.

$M_2 \xrightarrow{i} M_3$

(2) - Mq $\bar{6} \equiv 3 \perp m$

z, M_3, M_1, M_5, m, i, y, M_6, x, M_4, M_2, A_3

$M_1 \longrightarrow M_3 : \frac{2\pi}{3}$

$M_1M_3M_5 \xrightarrow{\bar{6}} M_2M_4M_6$

$M_1M_3M_5 \xrightarrow{m} M_2M_4M_6$

$M_1 \xrightarrow{3} M_3 \xrightarrow{3} M_5$

$\Rightarrow \bar{6} \equiv 3 \perp m$

Exercice 1

(4) - angle [100] et [111]

$\cos\theta = \frac{a}{a\sqrt{3}} \Rightarrow \theta$

$\vec{A} \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix}$ $\quad$ $\vec{B} \begin{vmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{vmatrix}$

$\vec{A} \cdot \vec{B} = |A||B| \cos(\vec{A}, \vec{B})$

Exercice 4

3m : rhomboédrique

4mm : quadratique

2/m : monoclinique

9	□	□	: Orthorombique
3	□	□	: rhomboédrique
□	3	□	: cubique
6	□	□	HexaGone
4	□	□	quadratique

3m

Miroir

Mi

$\pi/3$

Quand a axe d'ordre 3, on a 3 miroir contenir le plan.

- Quand on a axe d'ordre n ; on a n miroir contenir le plan

3/m

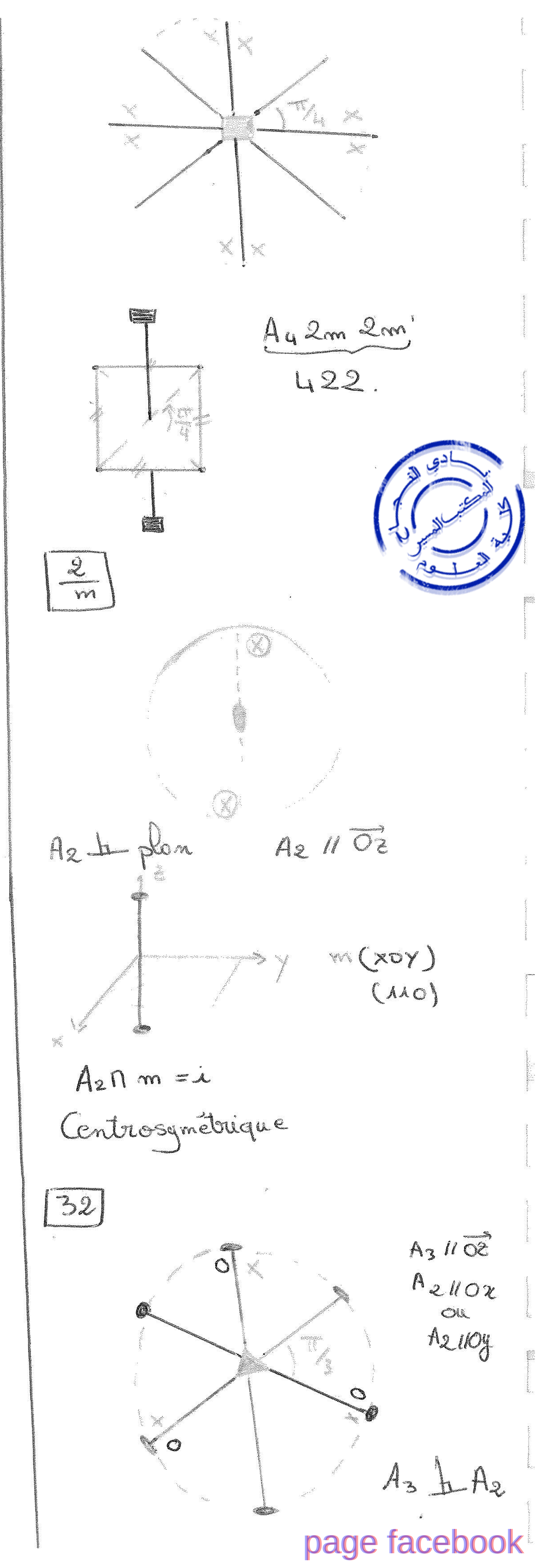
$A_3 \perp m$

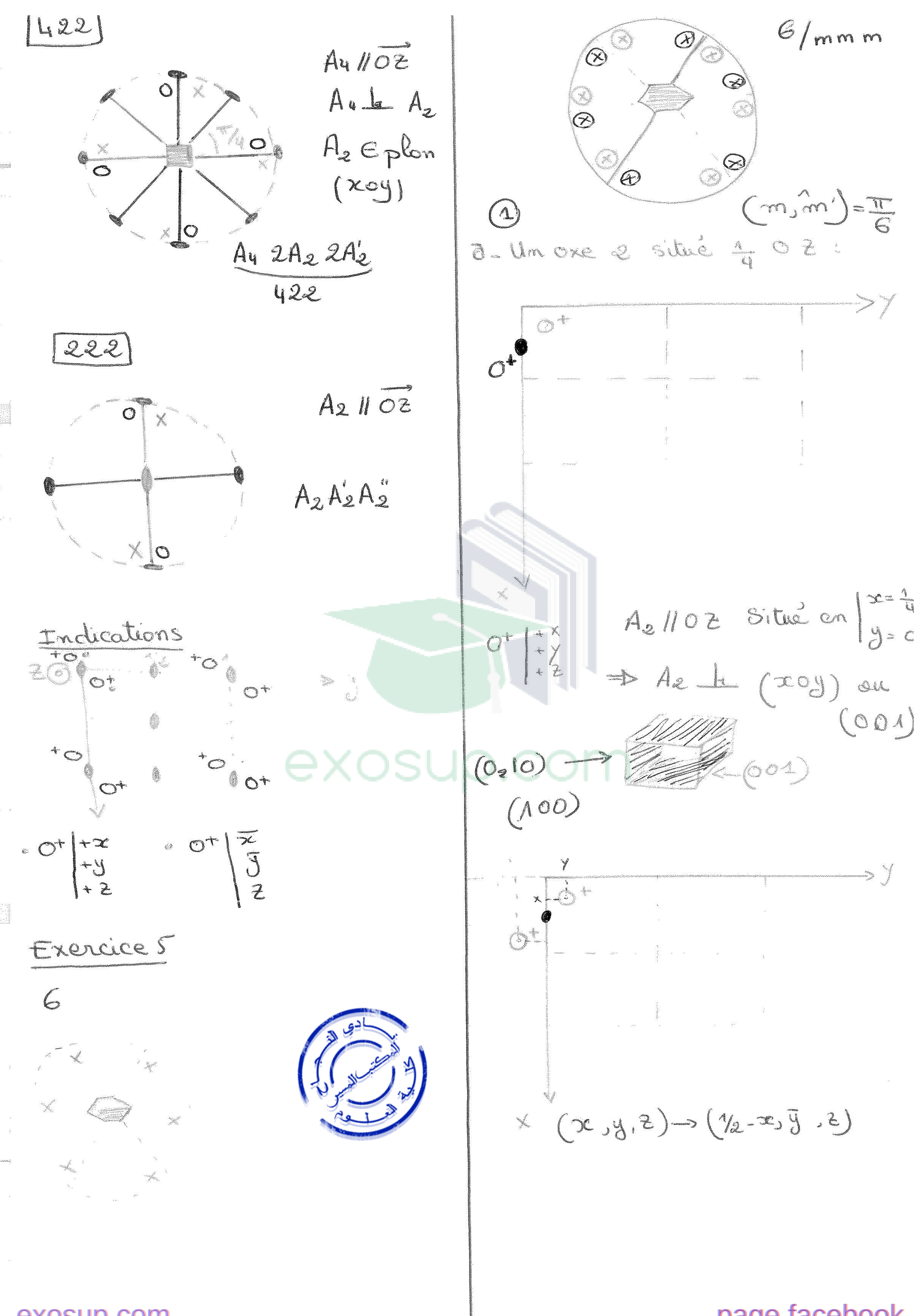
4mm

GPS

Group

ponctuel




422
A4 // Oz
A4 ⊥ A2
A2 ∈ plan (xoy)
A4 2A2 2A'2
422
222
A2 // Oz
A2 A'2 A''2
Indications
O+ | +x +y +z
O+ | x̄ ȳ z
Exercice 5
6
6/mmm
(m, m') = π/6
1
a - Un axe 2 situé 1/4 O z :
A2 // O z Situé en | x = 1/4 y = 0
⇒ A2 ⊥ (xoy) ou (001)
(010)
(100)
(001)
(x, y, z) → (1/2 - x, ȳ, z)
exosup.com
page facebook

$\frac{1}{2}$ B

M' ×

$\frac{1}{4}$ ← Elem de Symétrie

M ×

0

$OM \begin{vmatrix} 0 \\ x \\ z \end{vmatrix}$

$\vec{OM'} = \vec{OB} + \vec{BM'}$

$= \frac{1}{2} - \vec{OM}$

$= \frac{1}{2} - x.$

b. Un axe 2_1 situé sur $\frac{1}{4}$ O z

2_1 // Oz situé en $\begin{vmatrix} 1/4 \\ 0 \end{vmatrix}$

$2_1 \perp (xoy)$ ou (001)

2_1 : Rotation de $\frac{2\pi}{2} = \pi$ autour de A_2 // Oz, Suivant d'une Translation de $\vec{t} = \frac{\vec{c}}{2}$

O+ y

$\frac{1}{2}$+ O

x

$(x, y, z) \rightarrow (1/2 - x, \bar{y}, 1/2 + z)$

c. Un axe 2_1 Situé sur 1/4 y O

RQ

2_1 // Oz :

A_2 // (Ox, Oy) : ↔

2_1 // Ox :

2_1 // Oy :

A_2 // Oz :

2_1 // Oy situé en $\begin{vmatrix} x = 1/4 \\ z = 0 \end{vmatrix}$

O+ O- y

x

$(x, y, z) \rightarrow (1/2 - x, \frac{1}{2} + y, \bar{z})$

d. Un Centre d'inversion situé en 1/4 1/4 1/4

i en $\begin{vmatrix} x = 1/4 \\ y = 1/4 \\ z = 1/4 \end{vmatrix}$ i : o

O+ o $\frac{1}{4}$ $\frac{1}{2}$- O y

x

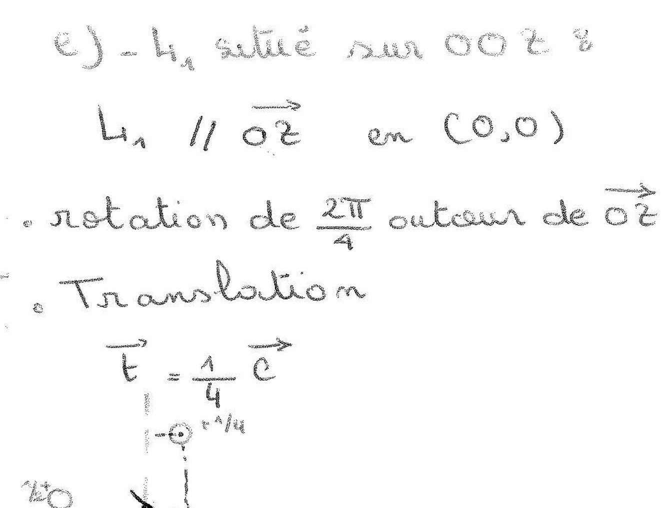
$(x, y, z) \xrightarrow{i} (1/2 - x, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - z)$

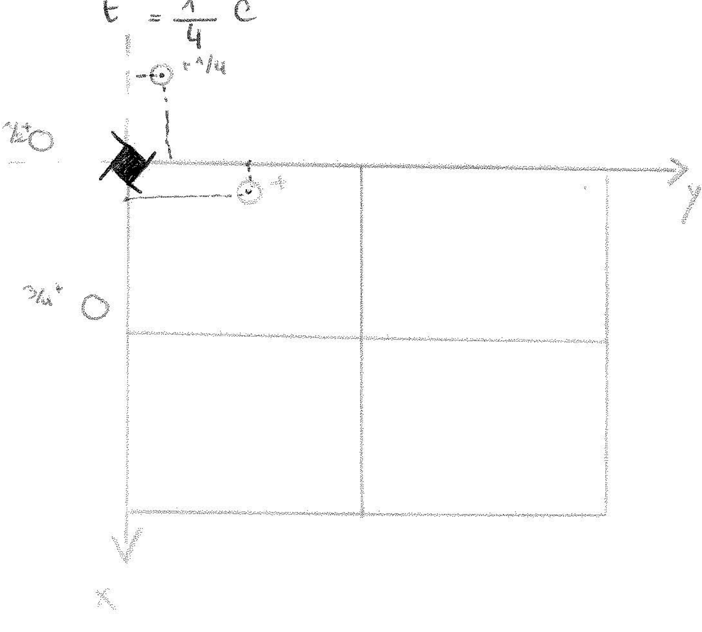
c) - L_4 situé sur OOz :

$L_4 \,//\, \vec{Oz}$ en $(0,0)$

- rotation de $\frac{2\pi}{4}$ autour de $\vec{Oz}$
- Translation

$\vec{t} = \frac{1}{4}\vec{c}$



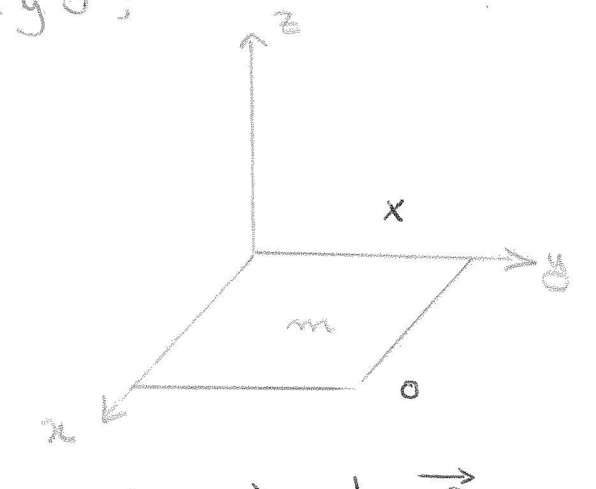


$(x\ y\ z) \longrightarrow (\bar{y}, x, \frac{1}{4}+z) \longrightarrow$

$(\bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2}+z) \longrightarrow (y, \bar{x}, \frac{3}{4}+z)$

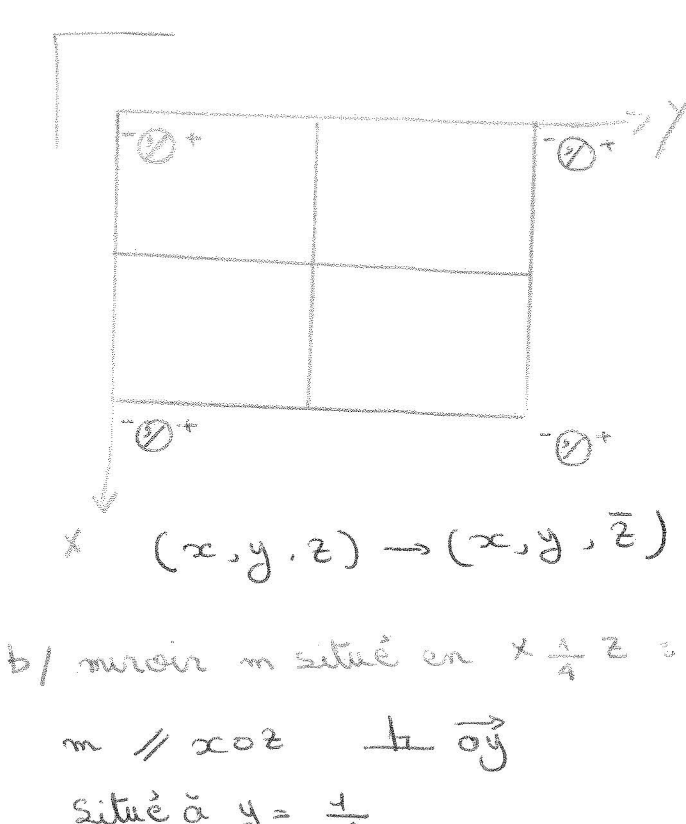
(2)

a - Un plan miroir m situé en $x\,y\,0$;



$m \,//\, (xoy) \perp \vec{Oz}$

$z = 0$

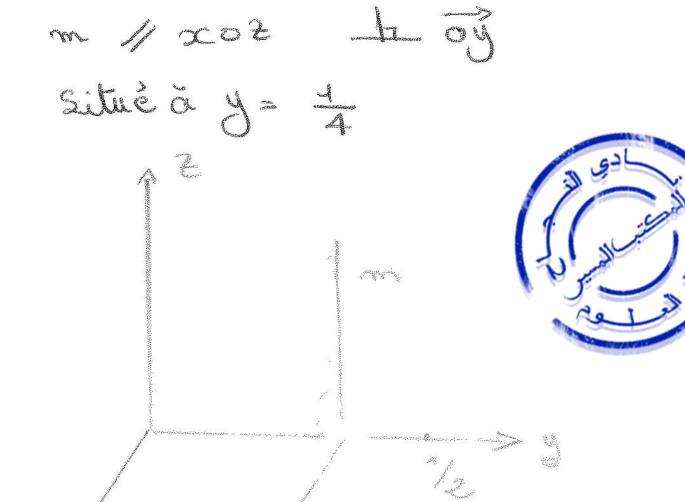


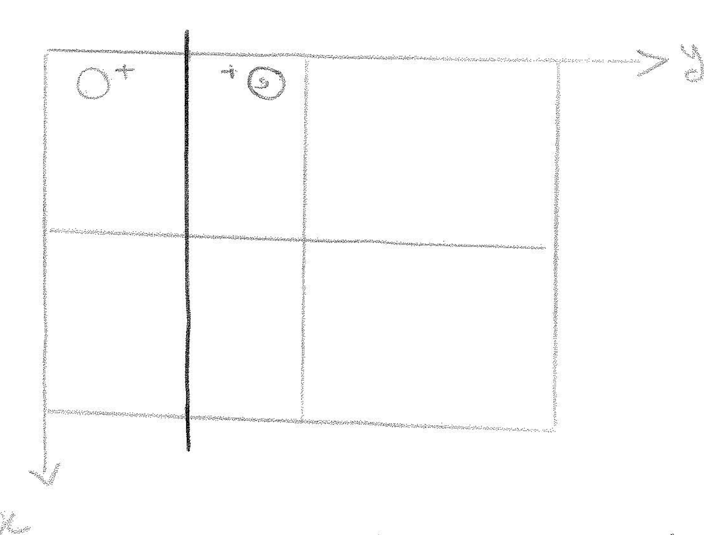
$(x, y, z) \longrightarrow (x, y, \bar{z})$

b/ miroir m situé en $x\,\frac{1}{4}\,z$:

$m \,//\, xoz \perp \vec{Oy}$

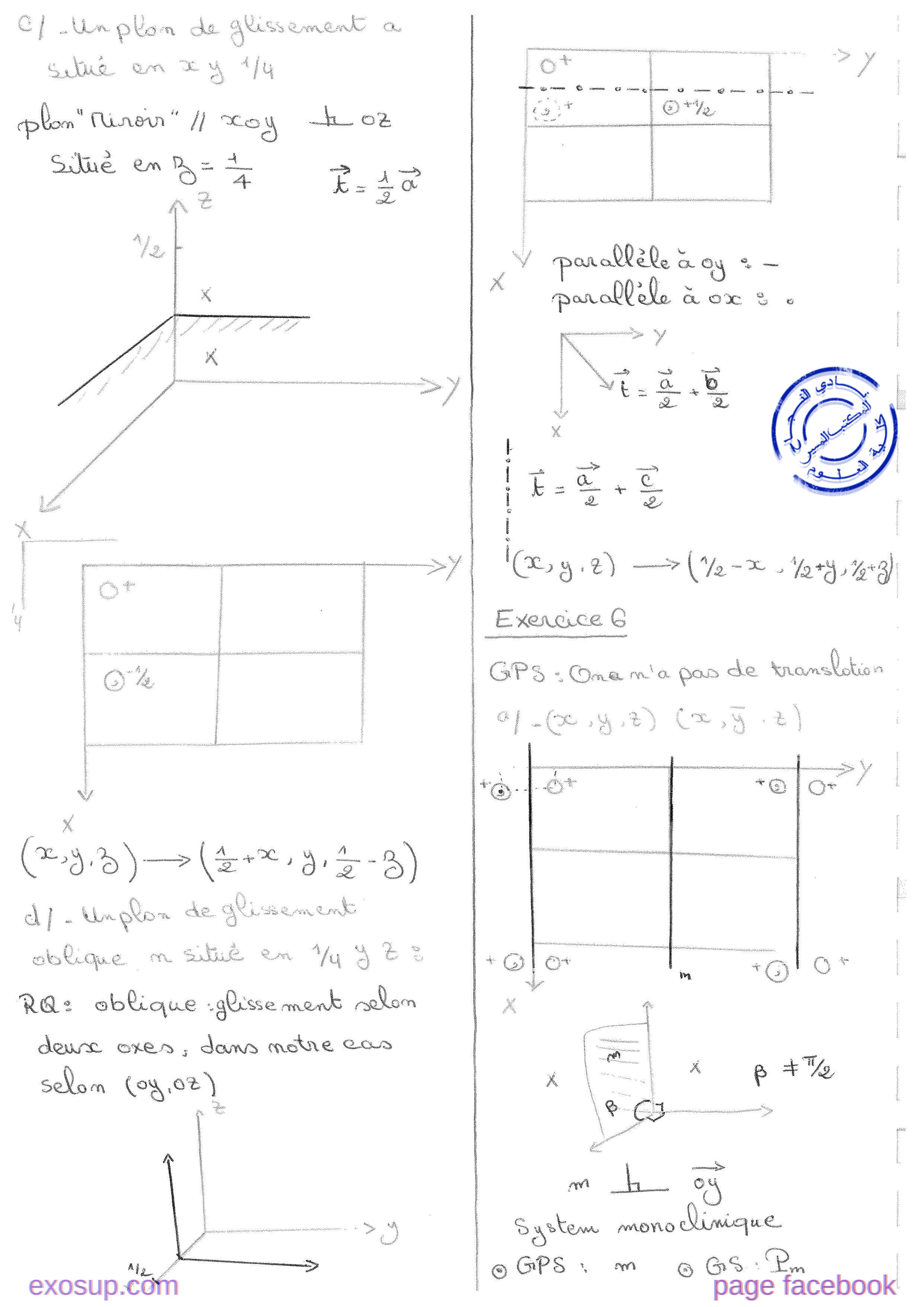
situé à $y = \frac{1}{4}$





$(x, y, z) \longrightarrow (x, \frac{1}{2} - y, z)$

RQ : l'image par miroir ⊙



c/ - Un plan de glissement a situé en x y 1/4

plan "miroir" // xoy ⊥ oz

Situé en $z = \frac{1}{4}$ $\vec{t} = \frac{1}{2}\vec{a}$

$(x, y, z) \longrightarrow (\frac{1}{2} + x, y, \frac{1}{2} - z)$

d/ - Un plan de glissement oblique n situé en 1/4 y z :

RQ : oblique : glissement selon deux axes, dans notre cas selon (oy, oz)

parallèle à oy : —

parallèle à ox : ∘

$\vec{t} = \frac{\vec{a}}{2} + \frac{\vec{b}}{2}$

$\vec{t} = \frac{\vec{a}}{2} + \frac{\vec{c}}{2}$

$(x, y, z) \longrightarrow (\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} + y, \frac{1}{2} + z)$

Exercice 6

GPS : On n'a pas de translation

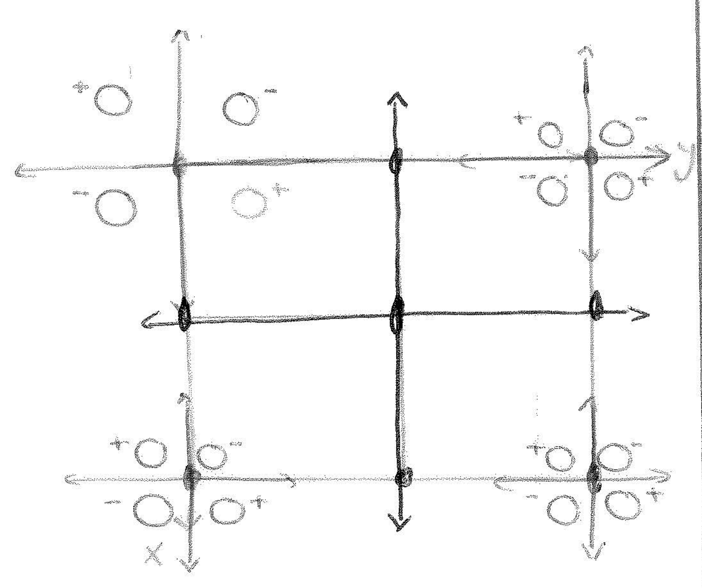
a/ - (x, y, z) $(x, \bar{y}, z)$

$m \perp \vec{oy}$

System monoclinique

⊙ GPS : m ⊙ GS : Pm

b- (x, y, z) $(\bar{x}, y, \bar{z})$ $(\bar{x}, \bar{y}, z)$
$(x, \bar{y}, \bar{z})$

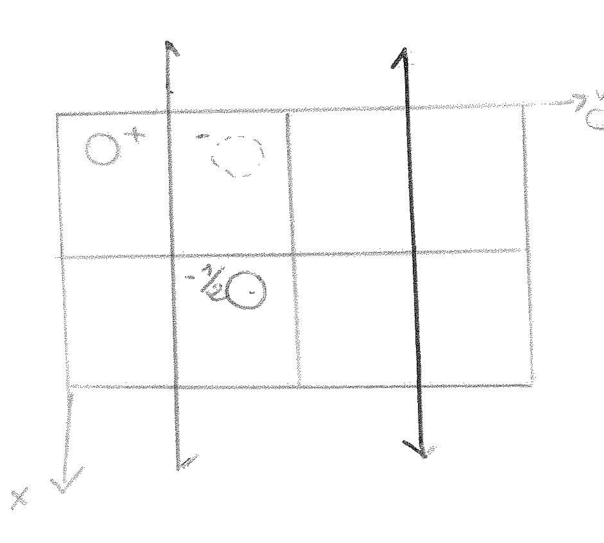


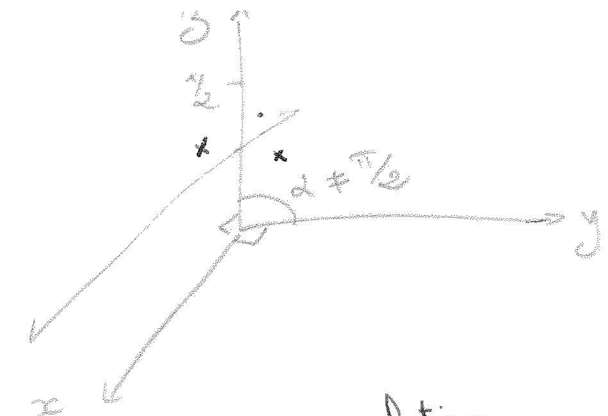
axe 2 // oz
axe 2 // oy
axe 2 // ox
- axe cachée
- axe principale

3 axe 2 ⇒ orthorombique
⇒ Mode P.

GPS : 222
GS : P_{222}

c- (x, y, z) $(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}-z)$





Rotation de π + Translation

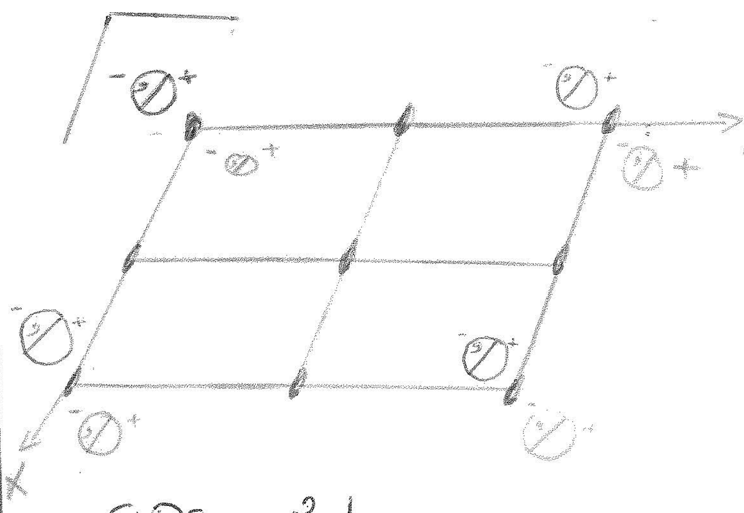
⇒ 2_1 // ox.
monoclinique
GPS : 2



RQ
Si on a :
$(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z)$ on peut
Remplacer (x, y, z) par 0
et on obtient $(1/2, 1/2, 1/2)$
⇒ Mode I

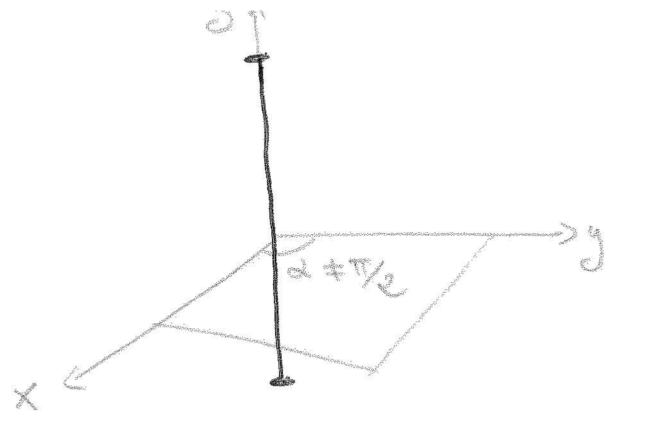
GS : P_{2_1}

d- (x, y, z) $(x, y, \bar{z})$ $(\bar{x}, \bar{y}, z)$
$(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$

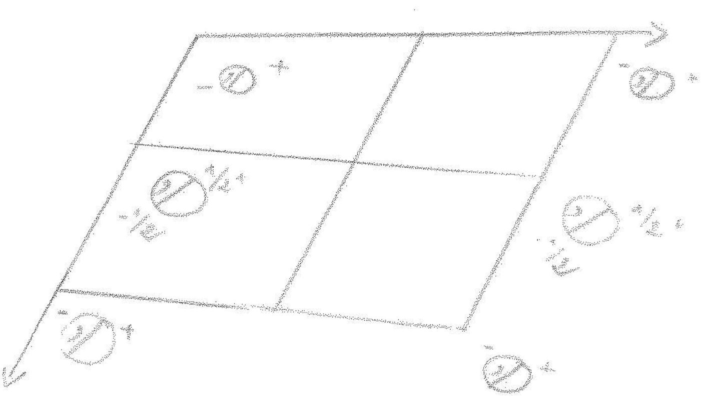


GPS : 2/m
Centrosymétrie
Mode P

GS : $P_{2/m}$



e- $(x,y,z)(x,y,\bar{z})(1/2+x, y, \frac{1}{2}+z)$
$(1/2+x, y, \frac{1}{2}-z)$



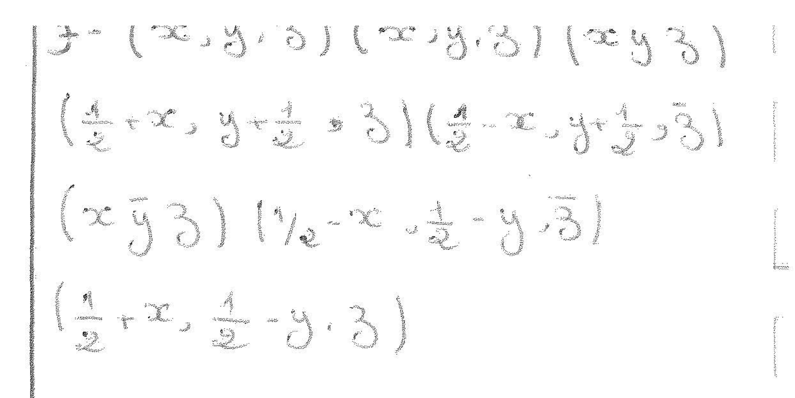
GPS : m

Mode B. (non centrosymétrie)

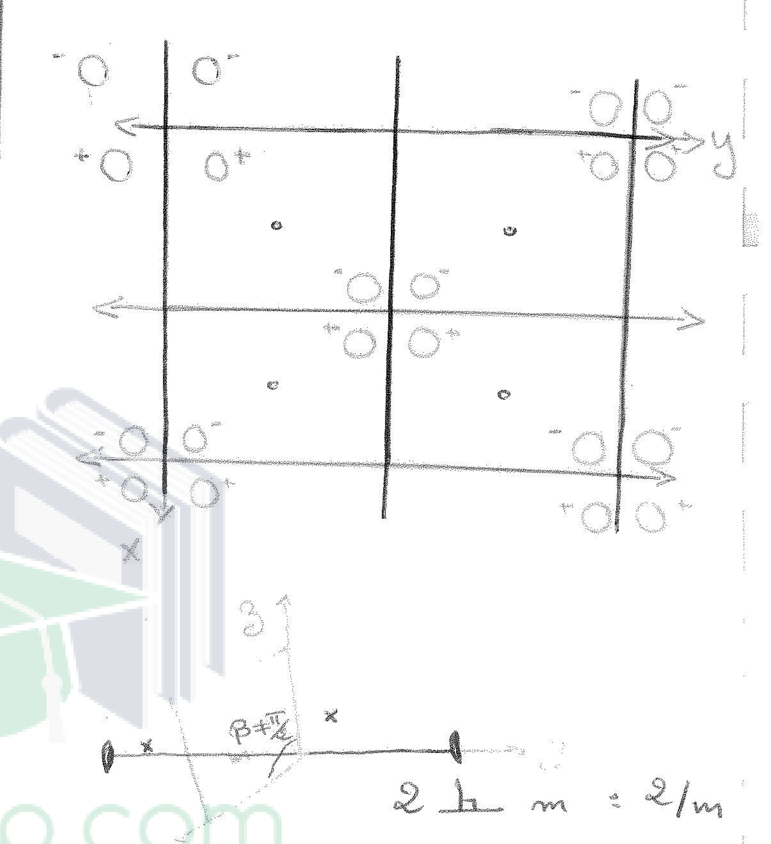
$(\frac{1}{2}x, y, \frac{1}{2}+z)$

si on Remplace par O, on obtient par $(1/2, 0, 1/2)$

$(\vec{a}, \vec{c})$ Centré GS : Bm
Monoclinique



f- $(x,y,z)(x,y,\bar{z})(x\,y\,z)$
$(\frac{1}{2}+x, y+\frac{1}{2}, z)(\frac{1}{2}-x, y+\frac{1}{2}, \bar{z})$
$(x\,\bar{y}\,z)(1/2-x, \frac{1}{2}-y, \bar{z})$
$(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-y, z)$



Sys monoclinique.

si on remplace O dans $(1/2+x, \frac{1}{2}+y, z)$ on obtient $(1/2, 1/2, 0)$

$\Rightarrow$ Mode C.

GPS : 2/m

GSS : $C_{2/m}$

∘ : Centre d'inversion



$y - (x, y, z)(y, x, z)(x, y, z)$

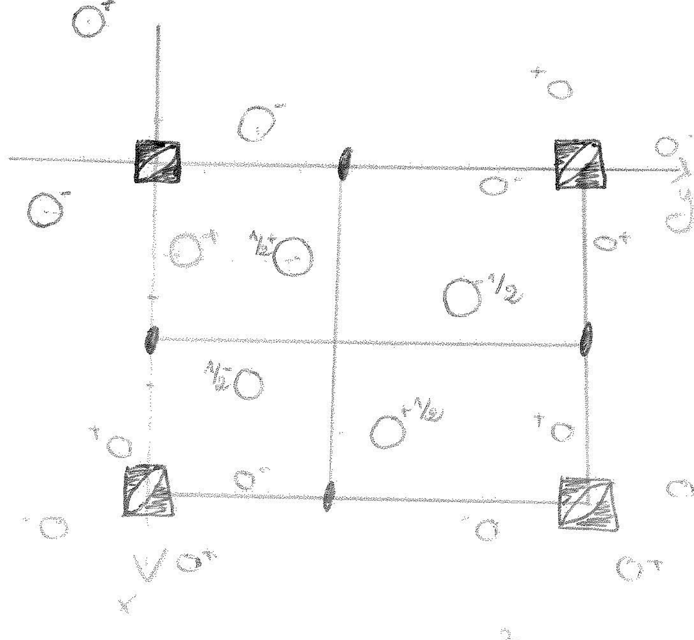
$(y, \bar{x}, \bar{z})(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z)$

$(\frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-z)$

$(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}+z)$

$(\frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}-z)$

l'axe 4 fait Transformer x ~~end~~ en y



Axe 4 avec Inversion

$A_4 // Oz$

Sys Quadratique.

GPS : $\bar{4}$

GSS : $I_{\bar{4}}$

Si on remplace O dans $(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z)$ on obtient $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \Rightarrow$ Centre

Exercice 7

1/- C'est la notation selon Herman-Mauguin.

- P : mode simple ou primitive.
- n : plan de glissement oblique $\perp$ ox.

l'opération de symétrie est : réflexion r/p (yoz) suivit de Translation

$\vec{t} = \frac{1}{2}\vec{b} + \frac{1}{2}\vec{c}$.

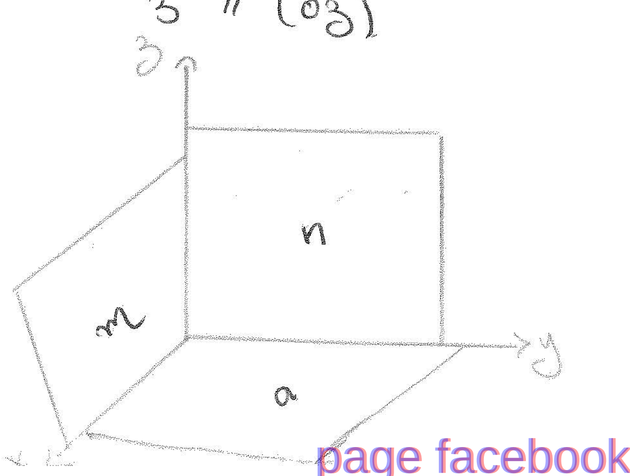
- m : plan miroir. $\perp \vec{oy}$: réflexion r/p (xoz)
- a : plan de glissement axial $\perp \vec{oz}$: Reflexion r/p (xoy) suivit de $\vec{t} = \frac{1}{2}\vec{a}$.

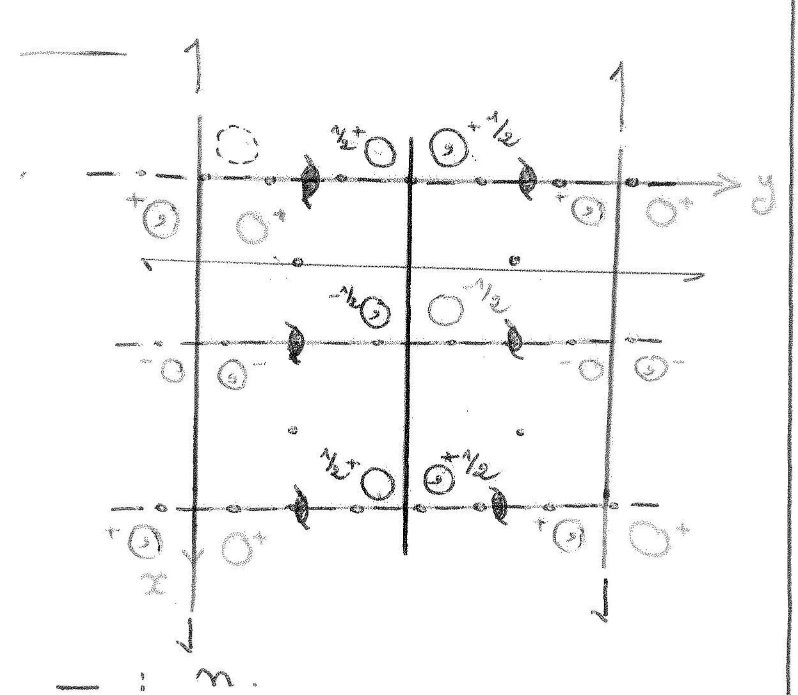
orthorombique

P_{123} :

⊛ Si plan : 1 $\perp$ (ox)
2 $\perp$ (oy)
3 $\perp$ (oz)

⊛ Si axe : 1 ~~$\perp$~~ 1 // (ox)
2 // (oy)
3 // (oz)





— : n.

— : a

— : m

— : miroir caché

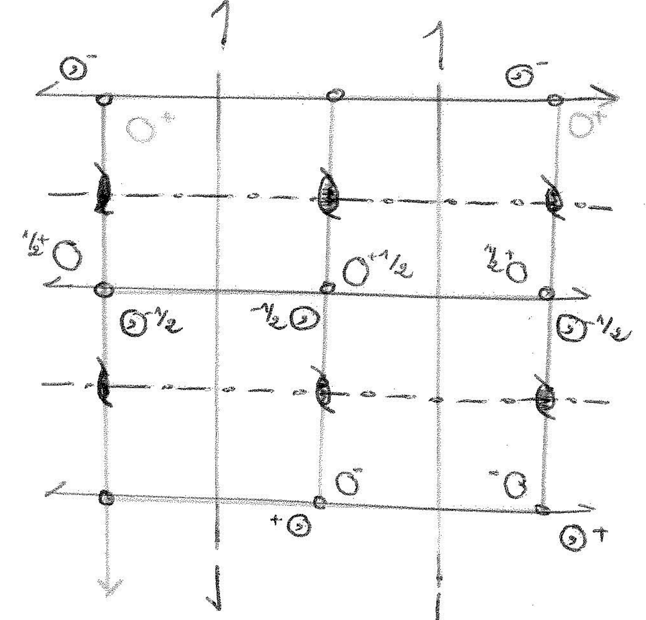
* axe 2_1 // ~~oy~~ oz
* axe 2_1 // ox
* axe 2_1 // oy

Si il y a Translation $(-\frac{1}{2})$ on pense à 2_1.

GPS : $P\, \frac{2_1}{a}\, \frac{2_1}{n}\, \frac{2_1}{m}$

4/-

Translation d'origine en $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$



Les positions générales

$(x\, y\, z)$ $(\bar{x}\, \bar{y}\, \bar{z})$ $(\bar{x}, \frac{1}{2}+y, \bar{z})$

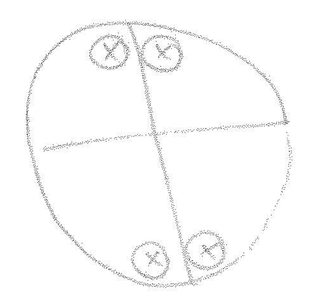
$(x, \frac{1}{2}-y, z)$ $(\frac{1}{2}-x, \bar{y}, \frac{1}{2}+z)$

$(\frac{1}{2}+x, \bar{y}, \frac{1}{2}-z)$

$(\frac{1}{2}+x, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}-z)$

$(\frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}+y, \frac{1}{2}+z)$

progection





L XL error
Error: IllegalOperatorSequence
Operator: BezierRelPath
Position: 500

5/- les positions qui ont sur les éléments de symétrie sans glissement

⇒ positions particulières.

⇒ Centre Inversion + miroir ($y = 1/4$)

6/

- il est holoèdre

$mmm = 222 + i$

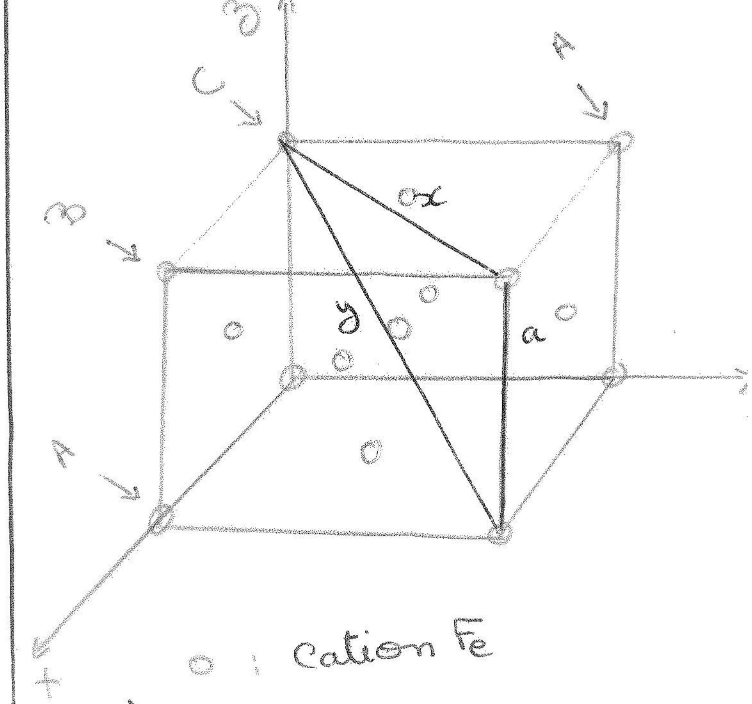
$S = 1 + 3 = 4$

$S' = 2S = 8$



Cristallochimie

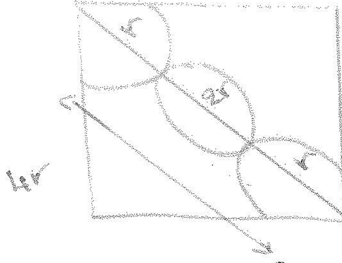
⊛ Structures cubiques



o : cation Fe

a)

C.C structure relaché c-à-d non compact



pour C.C : diagonale

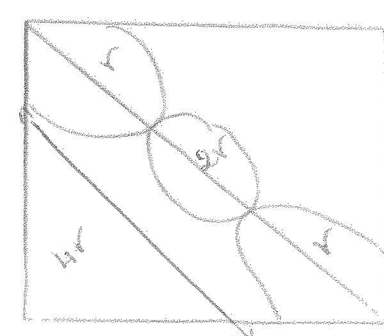
$x^2 = y^2 + a^2$

$x^2 = 2a^2 + a^2 = 3a^2$

$x = a\sqrt{3}$

$4r_\alpha = a\sqrt{3}$

$r_\alpha = \frac{a\sqrt{3}}{4}$

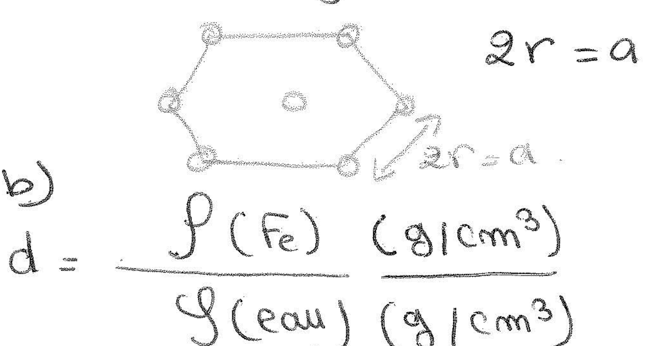


pour C.F.C : sur la face

$4r_\alpha = a\sqrt{2}$

$r_\alpha = \frac{a\sqrt{2}}{4}$

RQ : hexagonale



$2r = a$

b)

$d = \frac{\rho(Fe)\ (g/cm^3)}{\rho(eau)\ (g/cm^3)}$

sans unité

$d = \frac{m}{V} = \frac{nM}{V} \leftarrow a^3$

1 mol ⟶ N_A

(m) ⟶ Z

$m = \frac{Z}{N_A}$

d'où : $d = \frac{Z \cdot M}{N_A \cdot a^3}$

pour C.C :

$Z = (\frac{1}{8} * 8) + 1 = 2$ atom /Maille

pour CFC :

$Z = (\frac{1}{8} \times 8) + (\frac{1}{2} \times 6) = 4$ atom /Maille

c) _ la compacité :

$C = \frac{\text{Volume occupé par les atomes}}{\text{Volume de la maille}} \cdot 100$

$C = \frac{Z \cdot 4/3 \pi r^3}{a^3} \cdot 100$

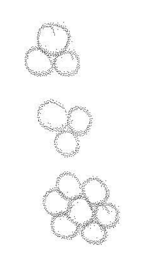
pour C.C : 68 %

pour CFC : 74 %

_ la coordinance :

. C.C : chaque atome est entouré par 8 atomes : [8]

. CFC : [12]



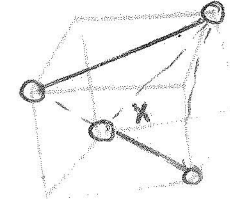


d) _ les sites [4] : CFC

[4]

B

A



x : site [4]

⟹ l'intersection du segement

__ et __

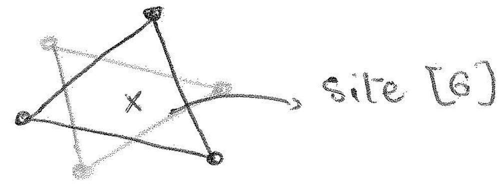
8 sites [4]

$(3/4\ \ 1/4\ \ 1/4)\ (1/4\ \ \frac{1}{4}\ \ 1/4)\ (\frac{3}{4}\ \ \frac{3}{4}\ \ 1/4)$

$(\frac{1}{4}\ \ \frac{3}{4}\ \ 1/4)\ (3/4\ \ 1/4\ \ 3/4)\ (\frac{1}{4}\ \ \frac{1}{4}\ \ 3/4)$

$(\frac{3}{4}\ \ \frac{3}{4}\ \ 3/4)\ (\frac{1}{4}\ \ \frac{3}{4}\ \ 3/4)$

_ les sites [6] :



avec rotation on obtient un octaèdre .

Il se trouve sur les arrêts et le centre

RQ :

dans Empliment compact CFC , HC .

nbr [4] = 2Z

nbr [6] = Z .

nbr [6] = $\left(\frac{1}{4} \times 12 + 1\right) = 4$

C.C

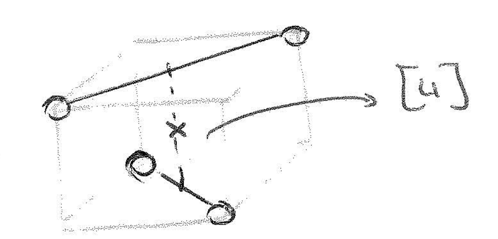
les sites [6]

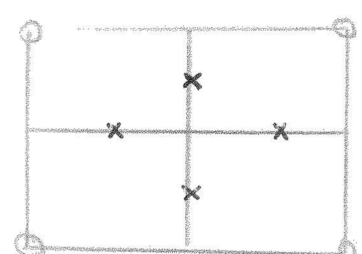
- au centre des faces
- au milieu des arrêts

nbr [6] = $\left(6 \times \frac{1}{2}\right) + \left(12 \times \frac{1}{4}\right)$

= 6 sites [6] / Maille C.C.

les sites [4]





← face

x : site [4]

chaque faces contient 4 sites [4].

⇒ 12 sites [4] / Maille c.c

✱ Structure Hexagonales :

①

$$a^2 = \frac{c^2}{4} + \left(\frac{2}{3}h\right)^2$$

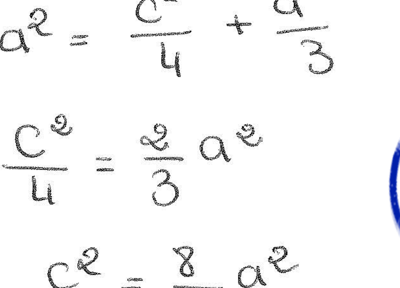
② $$a^2 = \frac{c^2}{4} + \frac{4}{9}h^2 \quad ✱$$

or $$a^2 = h^2 + \left(\frac{a}{2}\right)^2$$

$$h^2 = a^2 - \left(\frac{a}{2}\right)^2$$

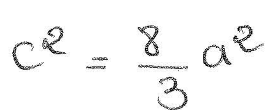
On remplace dans ✱

$$a^2 = \frac{c^2}{4} + \frac{4}{9}\,\frac{3a^2}{4}$$

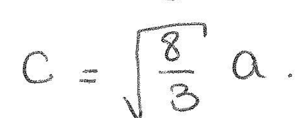


$$a^2 = \frac{c^2}{4} + \frac{a^2}{3}$$

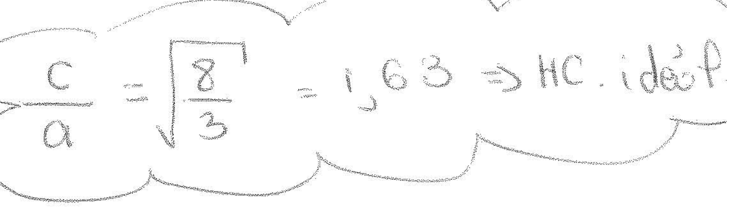
$$\frac{c^2}{4} = \frac{2}{3}a^2$$



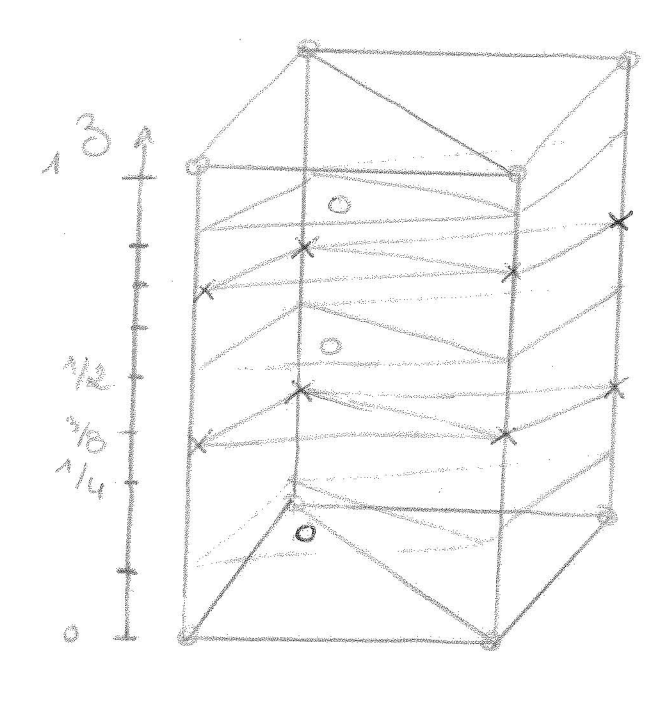
$$c^2 = \frac{8}{3}a^2$$



$$c = \sqrt{\frac{8}{3}}\,a .$$



$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} = 1,63 \Rightarrow \text{HC . idéal}$$



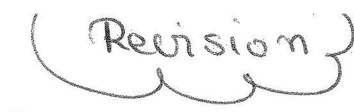
o Fe × site [4]

Il faut respecter $\alpha = 120$ dans la projection

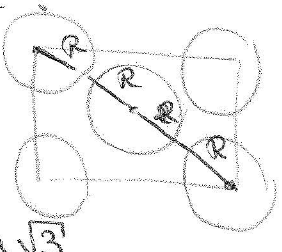
1P 2P

× $\ast$





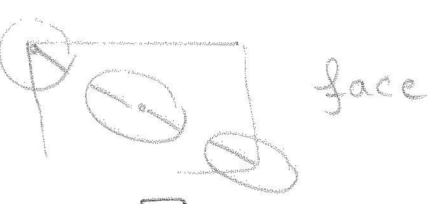
⊛ C.C :



$4R = a\sqrt{3}$

Coordinence : [8]

⊛ C.F.C



$4R = a\sqrt{2}$

Coordinence [12]

⊛ H.C :

- Maille Hexagonale

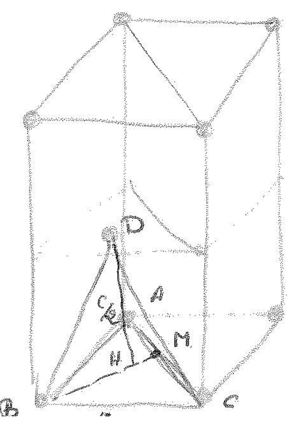
- 1 atomme à chaque sommet : $12 \times \frac{1}{6}$
- 1 atome à chaque centre des base $2 \times 1/2$
- 3 atome à $c/2$: 3×1

= 6 atomes / Maille

- Pseudo Maille

- 1 atome à chaque sommet $8 \times 1/8$
- 1 atome à $c/2$: 1

= 2 atomes / Pseudo



Volume :

$V = a \times BM \times C$

$= a \times a\sqrt{\frac{3}{2}} \times 2\sqrt{\frac{2}{3}}\, a$

$= \sqrt{2}\, a^3$

⇒ CsCl : CsBr, CSI, TlCl

⇒ ZnS : blende : ZnO, ZnS, CdS
CuCl, CuBr.

⇒ CaF_2 : SrF_2, BaF_2, $SrCl_2$,
SmF_2, PbF_2

⊛ Motif par pseudo-maille HC.

- angle 120° partage par 6 atome
- angle 60° partage par 12 atome

$Z = 4 \times (1/6) + 4 (1/12) + 1 = 2$ motif

site[4] $= 4 \times (1/3) + 4(1/6) + 2 = 4$

site [6] = 2 (intérieur)



Corrigé TD cristallochimie

A- STRUCTURES CUBIQUES

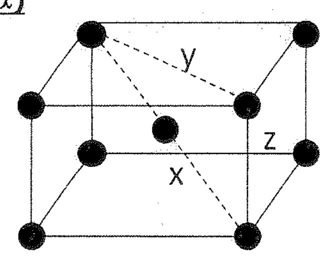
$a = b = c$
$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$

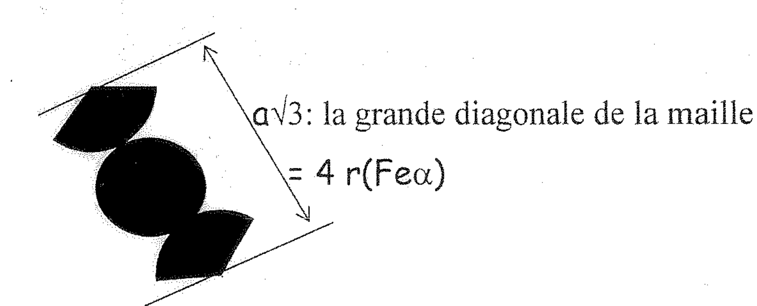
I- Fe cristallise sous 2 variétés :
- Feα : cubique centré (C.C) aα = 2.86 Å
- Feγ : cubique à faces centrée(C.F.C.) aα = 3.56 Å

a) Calcul du rayon atomique:



r(Feα)





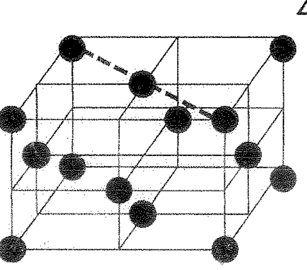
Pour le C.C. les atomes sont tangents (se touchent) selon la grande diagonale de la maille

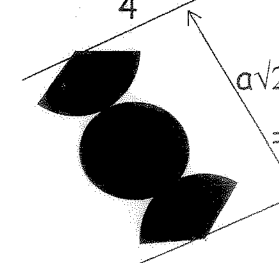
$x^2 = y^2 + z^2 = 2a^2 + a^2 = 3a^2 \Rightarrow x = a\sqrt{3}$: la grande diagonale de la maille

$$\text{d'où } r(Fe\alpha) = \frac{a\sqrt{3}}{4} = \frac{2{,}86\sqrt{3}}{4} = \boxed{1{,}24 \text{ Å}}$$

r(Feγ)

Pour le C.F.C. les atomes sont tangents selon la diagonale des faces de la maille





$$\text{d'où } r(Fe\gamma) = \frac{3{,}56\sqrt{2}}{4} = \boxed{1{,}26 \text{ Å}}$$

b) Calcul de la densité du fer:

$$d(Fe) = \frac{\rho(Fe)}{\rho(eau)} \qquad \rho(eau) = 1 \text{ g/cm}^3$$

d(Fe) est donc sans unité et on doit convertir Å en cm

$$= \frac{\text{masse du fer}}{\text{le volume qu'elle occupe}} = \frac{m}{v} = \frac{n\mathcal{M}(Fe)}{a^3} = \frac{Z\mathcal{M}(Fe)}{\mathcal{N}\ a^3}$$

$$\Rightarrow \quad d(Fe\alpha) = \frac{Z(\alpha)\ \mathcal{M}(Fe\alpha)}{\mathcal{N}\,(a(\alpha))^3} = 7{,}92$$

Avec Z(α) = 8(1/8) +1 = 2 atomes Feα/maille

$$d(Fe\gamma) = \frac{Z(\gamma)\ \mathcal{M}(Fe\ \gamma)}{\mathcal{N}\ (a(\gamma))^3} = 8{,}21$$

Avec Z(γ) = 8(1/8) +6(1/2) = 4 atomes Feγ /maille

b) * Calcul de la compacité :

$$\text{La compacité } \mathcal{C} = \frac{\text{Volume occupé par les atomes de fer}}{\text{Le volume de la maille}} \times 100$$

$$= \frac{Z\,(4/3\ \Pi\ R^3)}{V} \times 100 = \frac{Z \times 4\ \Pi\ R^3)}{3\ a3} \times 100$$

$\Rightarrow \quad \mathcal{C}(Fe\ \alpha) = 68\ \%$

$\mathcal{C}(Fe\ \gamma) = 74\ \%$



* *Calcul de la coordinence :* La coordinence d'un atome dans une structure métallique; c'est le nombre d'atomes les plus proches voisins

→ Pour le Fe α qui cristallise dans le C.C. (empilement non compact) le fer se trouve au centre du cube donc entouré par 8 atomes de fer (4 atomes en bas et 4 atomes en haut) donc :

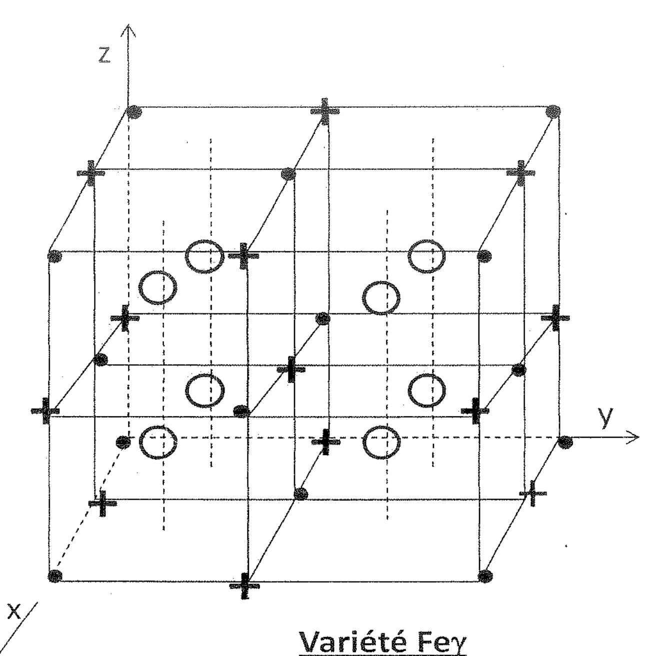
la coordinence (Feα/Feα) = 8

→ Pour le Fe γ qui cristallise dans le C.F.C. (empilement compact) le fer est entouré par 12 atomes du même plan d'empilement et 3 atomes du plan d'empilement suivant et 3 atomes du plan d'empilement précédant, donc le fer est entouré par 12 atomes de fer (6 atomes tangents à coté 3 atomes en bas et 3 atomes en haut) donc :

la coordinence (Fe γ /Fe γ) = 12

C) Sites interstitiels :

ils existent deux sortes de sites : sites octaédriques [6] et sites tétraédriques [4].un site[6] est le centre d'un octaèdre formé par 3 atome s d'un plan d'empilement et 3 atomes du plan suivant ou précédant et un site [4] est le centre d'un tétraèdre formé par 3 atomes d'un plan et un atome du plan suivant ou précédant
Dans **les empilements compacts** **(H.C. et C.F.C.)** les sites [6] sont au nombre de (Z) et les sites [4] sont au nombre de 2(Z).



Variété Feγ

● : l'atome Feγ
○ : site [4]
+ : site [6]

Coordonnées des sites [4]

(¼ , ¼ , ¼) (¼ , ¾ , ¼) (¾ , ¼ , ¼) (¾ , ¾ , ¼)
(¼ , ¼ , ¾) (¼ , ¾ , ¾) (¾ , ¼ , ¾) (¾ , ¾, ¾)
4 à la cote z= ¼ et 4 à la cote z= ¾

Coordonnées des sites [6]

(½ ,0,0); (0, ½,0) ;(0,0, ½); (½ , ½, ½)



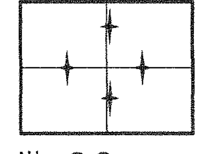
z
y
x

Variété Feα

• : site [6] ✦ : site [4]

Les sites [6] se trouvent au milieu des arêtes et aux centres des faces : 12× ¼ + 6 × ½ = 6 sites [6] / maille C.C.
Les sites [4] se trouvent sur les faces, on a 4 sites [4] / face :

De la manière suivante:



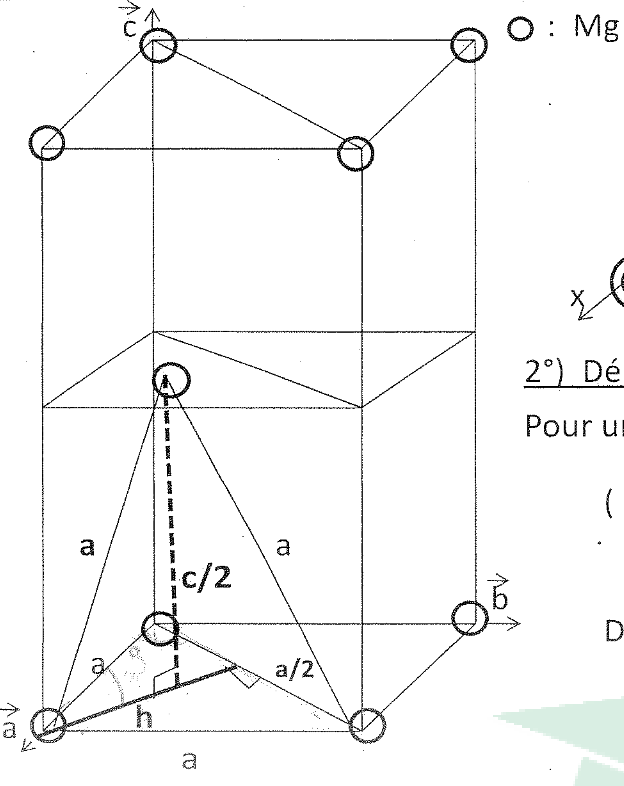
avec ✦ : site [4]

(4 × 6) × ½ = 12 sites [4] / maille C.C.

B- STRUCTURES HEXAGONALES

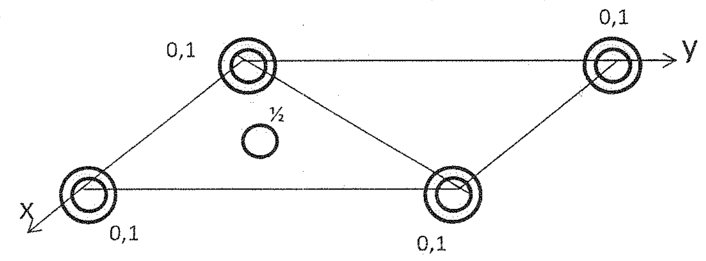
Si Mg cristallise dans une structure hexagonale compact idéale c'est que la condition suivante est vérifiée: $c/a = \sqrt{8/3} = 1,63$

1°) pseudo-maille (1/3 maille H.C.) en perspective (mode 3D) et sa projection sur (xoy):



○ : Mg

Projection sur le plan (x,y):



2°) Démonstration de $c/a = \sqrt{8/3}$:

Pour un H.C. idéal ce tétraèdre est régulier

$$(c/2)^2 + (2/3\ h)^2 = a^2$$

$$\text{Or : } a^2 = h^2 + a^2/4 \Rightarrow h^2 = 3a^2/4$$

$$\text{Donc: } c^2/a^2 = 8/3$$

D'où: $c/a = \sqrt{8/3} = 1,63$



3°) * Compacité de Mg:

$$\text{La compacité } \mathscr{C} = \frac{\text{Volume occupé par les atomes de Mg}}{\text{Le volume de la pseudo- maille}} \times 100$$

Le volume de la pseudo- maille: $v = (\vec{a} \wedge \vec{b}) . \vec{c} = a\ b \sin(\vec{a}, \vec{b}) . c = a^2 \sin(120°) . c = a^3\sqrt{2}$

$$\mathscr{C} = \frac{Z(4/3)\,\Pi\,R^3}{v} \times 100$$

$Z = 4(1/6) + 4(1/12) + 1(1) = 2$ atomes Mg/ pseudo-maille

$$\mathscr{C} = \frac{2(4)\,\Pi\,R^3}{3\sqrt{2}\,.\,a^3} \times 100 = \frac{2(4)\,\Pi\,R^3}{3\sqrt{2}\,.\,(2R)^3} \times 100 = 74\ \%$$

* Coordinence de Mg:

Mg est entouré de 12 atomes Mg voisins proches 6 du même plan 3 en dessus et 3 en dessous

La coordinence de (Mg/Mg)= 12

4°) Calcul du rayon métallique de Mg :

$$d(Mg) = \frac{\rho(Mg)\ (g/cm^3)}{\rho(eau)\ (g/cm^3)} = \frac{Z\mathcal{M}(Mg)}{\mathcal{N}\mathcal{V}} \text{ (sans unité)} \qquad \rho(eau) = 1\ (g/cm^3)$$

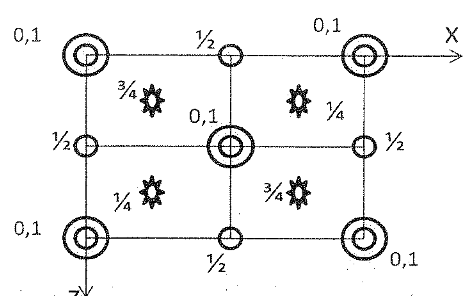
$$1,74 = \frac{2 \times 24,3}{6,022 . 10^{23}\sqrt{2} \times a^3} \Rightarrow a = 3,20 . 10^{-10}\ m \quad \text{or} \quad a = 2R(Mg)$$

$\Rightarrow$ R(Mg) = 1,6 Å

C- STRUCTURES IONIQUES

Exercice 1: Structure type ZnS blende

Structure MnS en projection sur (010) ou (xoz) (l'axe $\overrightarrow{oy}$ est⊥ au plan)



○ S^{2-}
✲ Mn^{2+}

1) a) coordonnées réduites des ions:

S^{2-} : (0,0,0);(½ , ½ , 0);(0, ½ , ½);(½ , 0, ½)

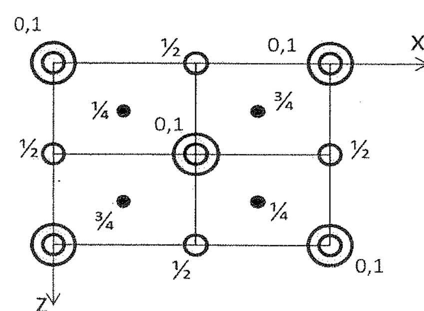
Mn^{2+}: (¼,¾ ,¼) ; (¾,¼,¼) ; (¼,¼, ¾) ; (¾,¾,¾)

1) b) Translation pour que l'origine soit à Mn^{2+}:

Une translation $\vec{T} = ¼\,\vec{a} + ¼\,\vec{b} + ¼\,\vec{c}$ (On ajoute (¼ , ¼ , ¼) à tous les coordonnées si dessus)

⇒ S^{2-} : (¼ , ¼ , ¼);(¾ , ¾ , ¼);(¼ , ¾ , ¾);(¾ , ¼ , ¾)

Mn^{2+} : (½ ,0 , ½) ; (0, ½ , ½) ; (½ , ½ , 0) ; (0, 0, 0)



● S^{2-}
○ Mn^{2+}

On obtient un réseau cationique C.F.C. de Mn^{2+} les anions occupent la moitié des sites tétraédrique, entourés de 4 cations plus proches

Donc la coordinence de S^{2-} / Mn^{2+} = 4

b) Le nombre de groupement formulaires par maille et sa formule chimique :

D'après les coordonnées on 4 S^{2-} / maille et 4 Mn^{2+}/ maille

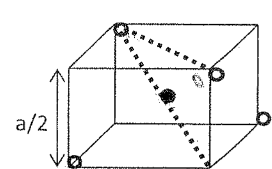
4 S^{2-} + 4 Mn^{2+} = 4(S^{2-} + Mn^{2+}) = 4 MnS /maille
MnS

⇒ formule brute : MnS Z= 4 MnS /maille

Justification:

(Masse volumique) $\rho = \dfrac{Z\mathcal{M}(MnS)}{\mathcal{N}V} \Rightarrow Z = \dfrac{\rho\,\mathcal{N}V}{\mathcal{M}(MnS)} = \dfrac{3{,}29 .\ 6{,}022\ 10^{23} .\ (5{,}6\ 10^{-8})^3}{(32{,}06 + 34{,}94)} = 3{,}999 \approx 4$

d) distance anion-cation : On prend un petit cube d'arête a/2



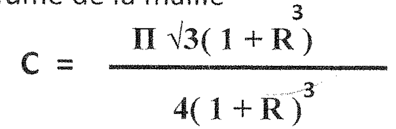
● S^{2-}
○ Mn^{2+}

$d_{Mn^{2-}-S^{2+}} = \dfrac{a\sqrt{3}}{4} = \dfrac{5{,}60\sqrt{3}}{4} = 2{,}423$ Å

2) a) avec l'origine en S : S forme un C.F.C. donc mode F
avec l'origine en Mn : S forme un C.F.C. donc mode F
⇒ Système cristallin mode F

b) Compacité en fonction de R Avec R= rc/ra (rc: rayon cationique et ra: rayon anionique)

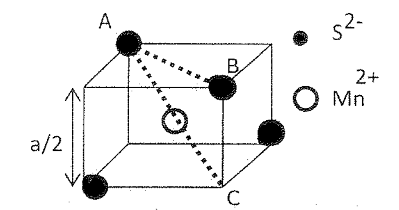
$C = \dfrac{\text{Volume occupé par les ions}}{\text{Volume de la maille}} = \dfrac{4(4/3)\,\Pi(rc^3 + ra^3)}{a^3}$ Or $a = 4(rc+ra)/\sqrt{3}$



$$C = \frac{\Pi\,\sqrt{3}(1 + R^3)}{4(1 + R)^3}$$



Domaine de variation de R: il s'agit de trouver lz condition théorique que doivent satisfaire les rayons ioniques pour que le composé MnS cristallise dans une structure type ZNS Blende



Selon AB : $a\sqrt{2}/2 \geq 2ra$ et selon AC: $a\sqrt{3}/4 = rc + ra$
D'où la relation: $rc/ra \geq \sqrt{3}/2 - 1$
On obtient le domaine de variation de R pour une éventuelle cristallisation dans la structure blende:
$\sqrt{3}/2 - 1 \leq R \leq \sqrt{2} - 1$ ou $0{,}225 \leq R \leq 0{,}414$

Exercice 2: Structure type Antifluorine

K_2Te est une structure antifluorine où Te occupe les nœuds d'un réseau C.F.C. et K^+ occupe tous les sites tétraédriques . Avec a= 8,17 Å

1) a) **position atomiques ou coordonnées réduites de K^+ et de Te^{2-} :**

K^+ : (¼, ¼ ,¼) ; (¾,¼,¼) (¼,¾ ,¼) ; (¾, ¾ ,¼) ; (¼,¼, ¾) ; (¾,¼, ¾) ;(¼,¾ , ¾); (¾,¾,¾)

Te^{2-} : (0,0,0);(½ , ½ , 0);(0, ½ , ½);(½ , 0, ½)

b) **nombre de motifs par maille :**

K^+ : Les ions potassium occupent la totalité des sites [4] ⇒ 8 K^+/ maille

Te^{2-} : Les ions tellure forment un C.F.C. : 8(1/8) + 6(1/2) ⇒ 4 Te^{2-} / maille

on a donc 4($2K^+$ + 1 Te^{2-}) ⇒ Z= 4 K_2Te / maille

c) **coordinence :**

Les ions potassium occupent des sites [4] donc la coordinence est 4 , c'est une structure de forme A_2B , donc les ions tellure seront entourés de (2×4) donc de 8 ions potassium

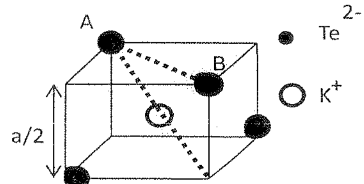
⇒ la coordinence de K_2Te est [4,8]

2) a) **Densité du cristal:**

$$d(K2Te) = \frac{\rho(K2Te)\ (g/cm^3)}{\rho(eau)\ (g/cm^3)} = \frac{Z\ \mathcal{M}(K2Te)}{\mathcal{N}\ \mathcal{V}} \text{ (sans unité)} \qquad \rho(eau) = 1\ (g/cm^3)$$

$$= \frac{4 \times 205{,}8}{6{,}02\ 10^{23}\ (8{,}17\ 10^{-8})^3} = 2{,}51$$

b) **parametre de la maille en fonction de ra rc(rayon anionique) et rc(rayon cationique) :**



$a\sqrt{3}/4 = ra + rc$
⇒ $a = 4(ra+rc)/\sqrt{3} = 8{,}17$ Å

⇒ a (calculé) = a (donné)



Exercice 3: Structure type NiAs (composé SeFe)

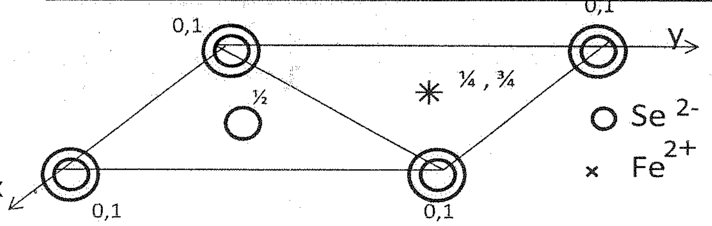
pseudo- maille

FeSe cristallise dans le système hexagonal type NiAs
Se^{2-} forme H.C. , Fe^{2+} occupent tous les sites [6]

1) a) coordonnées réduites de chaque ion

Se^{2-} : (0,0,0) ; (2/3, 1/3, 1/2)
Fe^{2+} : (1/3, 2/3, 1/4) ; (1/3, 2/3, 3/4)

b) Projection sur le plan (001) ou (x o y):



2) motif et coordinence de chaque ion

Motif: SeFe , Z?

Se^{2-} : 4(1/12) + 4(1/6) + 1 = 2 Se^{2-}/pseudo-maille
Fe^{2+} : 2×1 = 2 Fe^{2+}/pseudo-maille
⇒ Z= 2 ou 2 FeSe /pseudo-maille

Fe^{2+} occupe le site [6] donc coordinence de Fe est [6], structure de type AB donc coordinence de A = coord. B
⇒ Coordinence FeSe= [6,6]

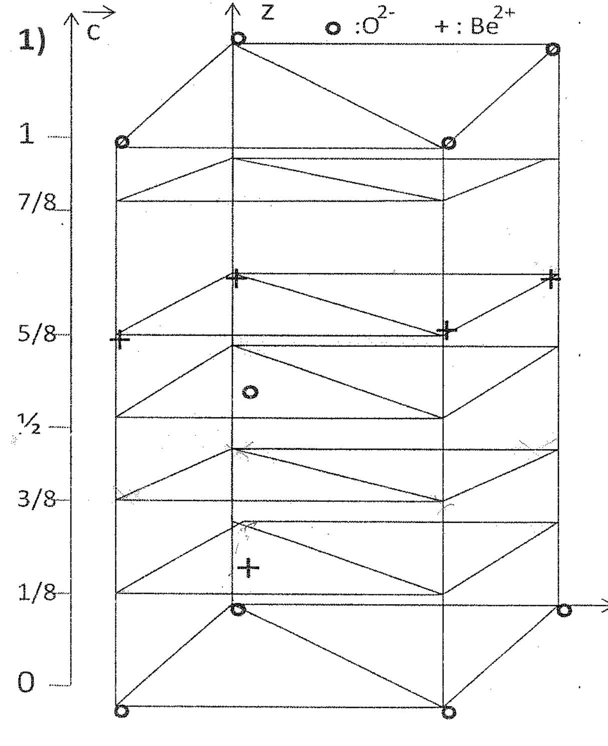
3) vérifions si FeSe cristallise dans un H.C. compact idéal ou parfait

$[c/a]_{Théorique} = \sqrt{8/3} = 1{,}633$ pour une structure H.C. idéale

$[c/a]_{expérimental} = \frac{5{,}96}{3{,}64} = 1{,}637 \Rightarrow$ FeSe cristallise dans une structure H.C. idéale

Exercice 4: Structure type ZnS wurtzite (composé BeO)

1)

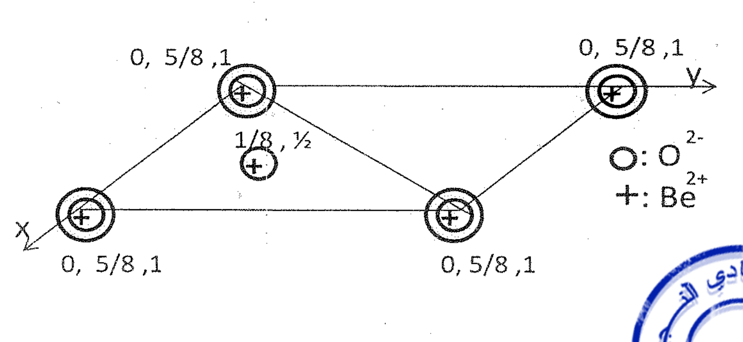


BeO cristallise dans le système hexagonal compact type ZnS wurtzite ; O^{2-} forme H.C. , Be^{2+} occupent la moitié des sites [4]

2) a= 2r(O^{2-}) = 2×1,40 ⇒ **a = 2,80 Å**

Si c/a = 1,633 ⇒ **c = 4,57 Å**

3) Projection ⊥ [001] ou ⊥ OZ ou ∥(X0Y)



FIN BON COURAGE

Pr. ZAKIA BELLEMKHANNATE